

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

**MODÉLISATION DE L'ENLÈVEMENT DU PHOSPHORE D'UN EFFLUENT
AGRO-ALIMENTAIRE TRAITÉ PAR RÉACTEUR BIOLOGIQUE SÉQUENTIEL**

RITHYA CAROLINE KY

**DÉPARTEMENT DES GÉNIES CIVIL, GÉOLOGIQUE ET DES MINES
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL**

**MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES (M.Sc.A)
(GÉNIE CIVIL)
AOÛT 1999**

© Rithya Caroline Ky, 1999



**National Library
of Canada**

**Acquisitions and
Bibliographic Services**

**395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada**

**Bibliothèque nationale
du Canada**

**Acquisitions et
services bibliographiques**

**395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada**

Your file Votre référence

Our file Notre référence

The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

The author retains ownership of the copyright in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

0-612-60899-9

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

**MODÉLISATION DE L'ENLÈVEMENT DU PHOSPHORE D'UN EFFLUENT
AGRO-ALIMENTAIRE TRAITÉ PAR RÉACTEUR BIOLOGIQUE SÉQUENTIEL**

présenté par: KY Rithya Caroline

en vue de l'obtention du diplôme de: Maîtrise ès sciences appliquées
a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de:

M. BRIÈRE François, M.E., président

M. COMEAU Yves, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. PERRIER Michel, Ph.D., membre et co-directeur de recherche

M. LAROSE Alain, Ph.D., membre

DÉDICACE

Ce mémoire est dédié à ma sœur, Chandra

REMERCIEMENTS

Je remercie tout d'abord mon directeur de recherche, Yves Comeau, et mon co-directeur, Michel Perrier, pour tout le soutien, l'écoute, les précieux conseils, et la disponibilité qu'ils m'ont accordée durant ce projet.

Je tiens à exprimer ma gratitude envers le CRNSG et mes directeurs pour le soutien financier attribué à ce projet.

Je remercie Alain Larose pour son soutien technique, sa générosité et ses conseils enrichissants. Je tiens aussi à remercier Peter Vanrolleghem pour son assistance durant son séjour à l'Ecole Polytechnique.

Un grand merci à Imre Takacs et Bruce Tole d'Hydromantis, pour tout le temps consacré au développement du modèle sur GPS-X, et pour leur assistance technique toujours infallible.

Je tiens à remercier Suzi, pour son support. Merci aussi à mes collègues "déphosphatateurs", Claudine Boisson et Samuel Martin, pour les intéressants échanges sur la bio-P et leurs encouragements. Merci en particulier à Claudine pour son assistance continue. Merci aussi à Manon Latour pour son efficacité.

Enfin, je tiens particulièrement à remercier ma famille pour son soutien inconditionnel, la patience et les encouragements prodigués tout le long de ma maîtrise.

RÉSUMÉ

Le phosphore constitue l'élément clé à contrôler afin de prévenir l'eutrophication des cours d'eau et des rivières. Dans le processus de déphosphatation biologique, le phosphore est stocké intracellulairement par des bactéries accumulatrices de polyphosphates (poly-P) quand la biomasse est soumise à une alternance de conditions anaérobies et aérobies ou anoxies. En conditions anaérobies, les poly-P et le glycogène fournissent l'énergie nécessaire au stockage d'acides gras volatils sous forme de polyhydroxyalcanoates (PHA). En conditions aérobies ou anoxies, les PHA fournissent alors l'énergie nécessaire à la synthèse du glycogène, au stockage des poly-P et à la croissance.

La modélisation de l'enlèvement du carbone et des nutriments peut s'avérer un outil très utile que ce soit à des fins de conception que pour des fins de recherche. Bien que la plupart des modèles aient été testés sur des effluents synthétiques et municipaux, relativement peu d'études portent sur la modélisation appliquée à des effluents industriels.

L'objectif principal de ce projet était de modéliser l'enlèvement du phosphore d'un effluent de fromagerie (Agropur, Notre-Dame-du-Bon-Conseil, Québec) traité par un réacteur biologique séquentiel (RBS).

Le modèle utilisé, nommé A3TX, se base sur les modèles ASM3 pour l'enlèvement du carbone, sur le modèle TUD (Technological University of Delft) pour l'enlèvement biologique du phosphore et sur le modèle de Maurer *et al.* pour la précipitation calcique du phosphore. Une fonction supplémentaire de type Monod fut ajoutée afin de tenir compte du rôle du magnésium sur la bio-P. Les logiciels de modélisation utilisés sont Matlab 5.3 et GPS-X 2.4.1. Les données expérimentales utilisées pour la calibration proviennent d'un suivi intensif réalisé au 120^{ième} jour d'opération d'un RBS pilote dont

les données proviennent d'une étude antérieure. La calibration du modèle fut effectuée en changeant les valeurs de quatre paramètres (Y_{PO4} : rapport du phosphore relargué sur acétate consommé en conditions anaérobies, Y_{PHAO} et Y_{PHANO} : rapport du PHA consommé sur la biomasse formée en conditions aérobies et anoxies, k_{PP} : taux de synthèse aérobie des poly-P). Les résultats finaux montrent une bonne adéquation entre le profil simulé et le profil expérimental de phosphore. Les concentrations de PHA et de poly-P simulées sont également proches des concentrations expérimentales.

Par la suite, le modèle fut intégré dans les bibliothèques du logiciel GPS-X à l'aide du Model Developer, un outil récemment développé permettant une génération automatique d'un code utilisable sur GPS-X à partir de macros écrites en Visual Basic et insérées dans Excel. Bien que les résultats obtenus avec les deux logiciels soient globalement similaires, certaines différences furent néanmoins observées : la concentration en poly-P prédite sur GPS-X est supérieure à celle prédite sur Matlab alors que la concentration en phosphore précipité est inférieure. Bien que la cause de ces différences n'ait pas été élucidée, une calibration supplémentaire sur GPS-X n'a pas été poursuivie.

Des analyses de sensibilité furent ensuite effectuées sur GPS-X afin de tester le modèle sur une gamme étendue de conditions et d'identifier les conditions optimales d'opération du RBS-pilote pour la bio-P. Les variables étudiées furent les concentrations affluentes de magnésium et d'acétate, la cyclologie d'opération du RBS, le temps de rétention hydraulique (TRH) et le temps de rétention des boues (TRB). L'analyse de sensibilité effectuée sur la concentration affluente de magnésium révèle que la modélisation du magnésium devrait être améliorée afin de tenir compte de l'effet inhibiteur sur la bio-P d'une concentration affluente de magnésium nulle. L'analyse de sensibilité effectuée sur l'acétate montre une efficacité accrue de l'enlèvement du phosphore avec une augmentation de la concentration d'acétate affluente. Les simulations effectuées sur les cyclologies montrent que la cyclologie expérimentale de 12 heures et divisée en 5 phases (phase anaérobie de 3 h, phase aérobie de 4 h, phase anoxie de 1,5 h, phase aérobie de

2,5 h et phase de sédimentation de 1 h) ne résulte pas en la concentration résiduelle de phosphore la plus faible. En effet, une concentration résiduelle quasi-similaire fut obtenue pour des cyclologies de 8h et de 6 h divisés en 5 phases, et une concentration résiduelle encore plus basse fut obtenue pour des cyclologies de seulement 2 phases (anaérobie – aérobie) d'une durée de 8 h et 12 h. Parmi les simulations effectuées, les TRH optimal, sur la base de la concentration résiduelle de phosphore est de 56 heures, soit supérieur au TRH expérimental de 48 heures. Le TRB optimal, sur la base de la concentration résiduelle de phosphore, serait de 13 jours, soit inférieur au TRB expérimental de 21 jours.

Ainsi, il fut montré dans ce projet que des modèles utilisés plus couramment sur des effluents synthétiques et municipaux donnaient, à condition d'ajouter une fonction supplémentaire considérant le rôle du magnésium dans la bio-P et de modifier certains paramètres sensibles, un potentiel prédictif intéressant de l'enlèvement du phosphore d'un effluent industriel. Un exemple de l'utilité de la modélisation de l'enlèvement du phosphore d'un effluent industriel traité par un RBS fut illustré à travers une série d'analyses de sensibilité. Celles-ci permirent de proposer des améliorations au modèle et quelques configurations optimales pour atteindre une concentration résiduelle de phosphore minimale.

La modélisation appliquée à un effluent industriel, soumis à des fluctuations dynamiques, et qui ne peut pas toujours être caractérisé de manière extensive, représente un défi de taille. Cette étude en est un exemple. Comme la calibration n'a été effectuée que sur un nombre très limité de données, les résultats doivent être interprétés avec précaution. Les résultats d'analyses de sensibilité doivent être non pas interprétés comme des résultats absolus, mais de manière semi-quantitative, comme des tendances relatives. Certains aspects du modèle devraient être améliorés, notamment la modélisation du rôle du magnésium dans la bio-P et la modélisation de l'azote ammoniacal et des nitrates. Certains points mériteraient aussi d'être approfondis comme les conditions favorables à

la croissance des bactéries accumulatrices de glycogène mais non déphosphatantes, le rôle d'acides gras volatils autres que l'acétate dans la bio-P et l'effet de la température. Enfin, pour compléter cette étude, il est recommandé de tester le modèle sur des séries de données provenant d'autres effluents industriels.

ABSTRACT

Phosphorus is the key element to control to avoid eutrophication. In a biological phosphorus removal (BPR) process, phosphorus is stored intracellularly by polyphosphate accumulating organisms when the biomass is subjected to alternating anaerobic and aerobic (or anoxic) conditions. Poly-P and glycogen provide energy for the anaerobic synthesis of PHA storage. In aerobic conditions, PHA provides energy for glycogen synthesis, poly-P storage and growth.

Modelling carbon and nutrients removal is a valuable tool for design purposes as well as for research studies. While models have been extensively tested on synthetic and municipal effluents, only a few studies have been performed on the applicability of models on highly loaded industrial effluents.

The main objective of this study was to model the biological phosphorus removal from a cheese factory effluent (Agropur, Notre-Dame-du-Bon-Conseil, Quebec) treated by a sequencing batch reactor.

The model used, named A3TX, was based on ASM3 for carbon removal, on the TUD (Technological University of Delft) model for phosphorus removal and on the Maurer *et al.* model for precipitation of phosphorus with calcium. An additional function was added to take into account the role of magnesium in BPR. The modelling softwares were Matlab 5.3 and GPS-X 2.4.1. The data used for calibration were taken from an extensive sampling performed on the 120th day of operation of a pilot-scale SBR. The model calibration was performed by changing the values of four parameters (Y_{PO4} : ratio of phosphorus released over acetate consumed, Y_{PHA0} and Y_{PHAN0} , ratios of PHA consumed over biomass formed under aerobic and anoxic conditions, k_{PP} : rate for the aerobic synthesis of poly-P). The final results show a rather good fit between simulated and

experimental phosphorus profiles. Simulated PHA and poly-P concentrations follow also closely the experimental concentrations.

Subsequently, the model code was entered into GPS-X libraries by means of the Model Developer, a newly developed tool allowing a convenient generation of GPS-X code from an Excel Visual Basic macro. Globally, the simulated results obtained from GPS-X were in accordance with those obtained from Matlab except for the poly-P and precipitated phosphorus concentrations. Indeed, the poly-P concentration predicted in GPS-X was higher than in Matlab whereas the precipitated phosphorus concentration was lower. Despite these differences, the model calibration was not pursued further.

Sensitivity analyses were then performed on GPS-X, in order to test the model under a variety of conditions and to identify the optimal conditions of operation for BPR. The variables studied were the influent concentrations of magnesium and acetate, the cycle of operation of the SBR, the hydraulic retention time (HRT) and the sludge residence time (SRT). The sensitivity analysis performed on the influent magnesium concentration suggested that the modelling of magnesium should be improved in order to inhibit the BPR when no magnesium is present in the influent. The sensitivity analysis performed on acetate showed a marked increase in BPR with an increase in the acetate influent concentration. Among the operation cycles tested, the experimental SBR operation cycle of 12 hours divided into 5 phases (non-aerated phase of 3 h, aerated phase of 4 h, non-aerated phase of 1.5 h, aerated phase of 2.5 h and finally settling phase of 1 h) was not the cycle giving the lowest phosphorus residual concentration. Indeed, approximately the same phosphorus residual concentration was obtained for 5 phases cycles of a duration of 6 h and 8 h, and lower concentrations were even attained for cycles of a duration of 12 h and 8 h, divided into only 2 phases (non aerated – aerated). Among the simulations performed, the optimal HRT and SRT were shown to be respectively close to 56 hours – higher than the experimental HRT of 48 hours and 13 days – lower than the experimental SRT of 21 days.

In this project, models more frequently used on synthetic and municipal effluents were shown to give a good prediction potential on BPR from a highly loaded industrial effluent, provided an additional function to consider the influence of magnesium on BPR and some parameters adjustments. An immediate example of the usefulness of such models used on industrial effluents treated by SBRs was illustrated by a series of sensitivity analyses aiming to identify optimal operation conditions for BPR.

Modelling phosphorus removal from industrial effluents, submitted to varying conditions and often not extensively characterised, can be quite challenging. This study provides only a specific example. Results should be interpreted carefully, as only a limited number of data have been used for calibration. Sensitivity analyses results should be interpreted in a semi-quantitative way, as relative trends. Some aspects of the model should be improved, in particular the modelling of magnesium and the ammonia and nitrates calibration. The parameters adjustments performed for calibration pointed out the need to gain a better knowledge of the conditions favouring the growth of GAOs (glycogen accumulating organisms) and the need to understand better the role of VFAs other than acetate in BPR. Temperature effect on BPR may also have to be taken into account. To gain more confidence in the applicability of the A3TX model on industrial effluents, it should be extensively tested against other industrial effluent data tests.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iv
REMERCIEMENTS	v
SOMMAIRE	vi
ABSTRACT	x
TABLE DES MATIÈRES.....	xiii
LISTE DES TABLEAUX.....	xviii
LISTE DES FIGURES.....	xix
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS.....	xxiv
LISTE DES ANNEXES.....	xxiii
 CHAPITRE I : INTRODUCTION	 1
1.1 Problématique.....	1
1.1.1 Problèmes occasionnés par le phosphore	1
1.1.2 Avantages de la déphosphatation biologique	1
1.1.3 Utilité de la modélisation	2
1.2 Mise en contexte	3
1.2.1 Présentation du projet Agropur.....	3
1.2.2 Étude de modélisation réalisée avec le modèle de Dold	5
1.3 Objectifs	6
1.4 Organisation du mémoire	7
 CHAPITRE II : REVUE DE LITTÉRATURE	 9
2.1 Conditions requises pour la déphosphatation biologique	9
2.1.1 Séquence anaérobie/aérobie.....	9
2.1.2 Présence d'acides gras volatils (AGV).....	9

2.1.3	Exclusion de nitrates de la zone anaérobie.....	10
2.1.4	Exclusion des GAO (glycogen accumulating organisms) de la zone anaérobie.....	10
2.2	Modèles biochimiques	11
2.2.1	Modèles biochimiques en conditions anaérobies.....	11
2.2.2	Modèles biochimiques en conditions aérobie.....	13
2.3	Modélisation mathématique	15
2.3.1	Modèles décrivant l'enlèvement du carbone et de l'azote (ASM1 et ASM3)	15
2.3.2	Modèles de Dold et modèle ASM2	17
2.3.3	Modèle TUD (Technological University of Delft)	19
2.3.3.1	Modèle de Smolders <i>et al</i> (1994a, 1994b, 1995)	19
2.3.3.2	Modèle de Murnleitner <i>et al.</i> (1997)	21
2.3.4	Modélisation de la précipitation du phosphore avec des métaux	21
2.3.5	Intégration de modèles pour applications à grande échelle.....	22
CHAPITRE III : CHAPITRE SYNTHÈSE		23
3.1	Introduction.....	23
3.2	Développement et mise en application du modèle avec les données d'Agropur	24
3.2.1	Modèles.....	24
3.2.2	Logiciels de modélisation.....	25
3.2.3	Conditions expérimentales.....	26
3.2.4	Adaptation du modèle aux conditions expérimentales d'Agropur.....	26
3.2.5	Calibration.....	28
3.2.6	Résultats finaux.....	29
3.2.6.1	Résultats obtenus avec le logiciel Matlab 5.3.....	29
3.2.6.2	Résultats obtenus avec le logiciel GPS-X 2.4.1	30
3.2.6.3	Conclusion	30

3.3 Analyses de sensibilité réalisées sur GPS-X (résumé du chapitre V).....	31
3.3.1 Analyses de sensibilité effectuées sur les concentrations affluentes.....	31
3.3.3.1 Concentrations affluentes de magnésium.....	31
3.3.3.2 Concentrations affluentes d'acétate.....	32
3.3.2 Analyses de sensibilité effectuées sur les paramètres opérationnels.....	32
3.3.2.1 Cyclologies d'opération du RBS	32
3.3.2.2 Temps de rétention hydraulique.....	33
3.3.2.3 Temps de rétention des boues.....	33
3.3.2.4 Conclusion	34
3.4 Principaux aspects à améliorer (résumé du chapitre VI).....	34

CHAPITRE IV : MODELLING OF THE BIOLOGICAL PHOSPHORUS REMOVAL FROM A CHEESE FACTORY EFFLUENT BY AN SBR.....36

MANUSCRIT: MODELLING OF THE BIOLOGICAL PHOSPHORUS REMOVAL FROM A CHEESE FACTORY EFFLUENT BY AN SBR37

4.1 Abstract.....	37
4.2 Keywords.....	37
4.3 Introduction.....	38
4.4 Methodology.....	39
4.4.1 Models	39
4.4.2 Modelling software	40
4.4.3 Pilot-scale SBR	41
4.4.4 Calibration	41
4.5 Results and discussion.....	41
4.6 Conclusion.....	49
4.7 Acknowledgements.....	52
4.8 References.....	52

CHAPITRE V MODÉLISATION DE L'ENLÈVEMENT DU PHOSPHORE D'UN EFFLUENT AGRO-ALIMENTAIRE : ANALYSES DE SENSIBILITÉ.....55

5.1 Introduction.....	55
5.2 Méthodologie.....	55
5.3 Simulations prévues	58
5.3.1 Concentrations affluentes.....	58
5.3.2 Conditions opérationnelles.....	59
5.3.2.1 Cyclologie d'opération du RBS.....	59
5.3.2.2 Temps de rétention hydraulique.....	60
5.3.2.3 Temps de rétention des boues.....	60
5.4 Résultats et discussion.....	61
5.4.1 Concentrations affluentes.....	61
5.4.1.1 Concentrations affluentes de magnésium	61
5.4.1.2 Concentrations affluentes d'acétate.....	64
5.4.2 Conditions opérationnelles.....	67
5.4.2.1 Cyclologie du RBS.....	67
5.4.2.2 Temps de rétention hydraulique	74
5.4.2.3 Temps de rétention des boues.....	80
5.5 Synthèse et conclusion.....	86

CHAPITRE VI ÉTUDES COMPLÉMENTAIRES91

6.1 Modélisation du magnésium	91
6.2 Modélisation de l'azote ammoniacal et des nitrates.....	94
6.3 Autres aspects à améliorer	95
6.3.1 Problèmes numériques	95
6.3.2 Rôle du PHA	96
6.3.3 Effet de la température	96
6.4 Conclusion.....	97

CONCLUSION GÉNÉRALE.....	98
RECOMMANDATIONS.....	101
RÉFÉRENCES.....	103
ANNEXES.....	109

LISTE DES TABLEAUX

<u>Tableau 4.1</u>	C,N and P state variables and processes of the “A3TX” model	43
<u>Tableau 4.2</u>	Influent SBR characteristics.....	46
<u>Tableau 4.3</u>	Operational conditions for the SBR.....	46
<u>Tableau 4.4</u>	SBR operating cycle.....	46
<u>Tableau 4.5</u>	Parameters adjusted for model calibration.....	49
<u>Tableau 4.6</u>	Experimental and simulated concentrations for the SBR.....	49
<u>Tableau 5.1</u>	Résultats de calibration obtenus sur GPS-X.....	56
<u>Tableau 5.2</u>	Concentrations en magnésium simulées à l'alimentation.....	58
<u>Tableau 5.3</u>	Concentrations en acétate simulées à l'alimentation.....	58
<u>Tableau 5.4</u>	Cyclologies d'opération du RBS simulées.....	59
<u>Tableau 5.5</u>	Temps de rétention hydrauliques simulés.....	60
<u>Tableau 5.6</u>	Temps de rétention des boues simulés.....	61
<u>Tableau 5.7</u>	Résumé des conditions simulées et principaux résultats.....	90

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1	Schéma simplifié des procédés à l'échelle-pilote.....	4
Figure 2.1	Processus anaérobies (A) et aérobies (B) de la déphosphatation biologique selon Comeau <i>et al</i> (1986) (CTE = chaîne de transporteurs d'électrons, K: cycle de Krebs, Me: métaux (K^+ , Mg^{2+})).....	14
Figure 2.2	Processus anaérobies (A) et aérobies (B) de la déphosphatation biologique selon Smolders <i>et al.</i> (1994a, 1994b, 1995) (glyc: glycogène, K: cycle de Krebs, G: glycolyse, GN: gluconéogénèse, GX: "glyoxylate cycle").....	14
Figure 2.3	Processus du modèle ASM1.....	17
Figure 2.4	Processus du modèle ASM3.....	17
Figure 3.1	Relation entre le taux de recaptage de phosphore (rp) et la concentration en magnésium (◆ : données expérimentales, — : fonction Monod d'équation $rp = 120 * ([Mg] / ([Mg] + 10))$ pour le suivi intensif correspondant au 120 ^{ième} jour d'opération du RBS.....	27
Figure 3.2	Relation entre les concentrations expérimentales de magnésium et de phosphore (■ : données expérimentales, — : droite de régression) pour le suivi intensif correspondant au 120 ^{ième} jour d'opération du RBS pilote... 27	27
Figure 4.1	Processes of the A3TX model.....	45
Figure 4.2	Comparison between experimental (data points) phosphorus and magnesium profiles before (—) and after (—) calibration.	51
Figure 4.3	Simulated profiles of X_{PAO} storage compounds.....	51
Figure 5.1	Comparaison entre les profils de phosphore simulés sur GPS-X (---), Matlab (—) et le profil expérimental (●) de la 120 ^{ième} journée d'opération du RBS-pilote	56
Figure 5.2	Profils simulés sur GPS-X (---) et sur Matlab (—) des composés de stockage des PAO (PHA, poly-P et glycogène) et données expérimentales pour le PHA (●) et pour les poly-P (◆) correspondant à la 120 ^{ième} journée d'opération du RBS-pilote.....	57

Figure 5.3	Profils simulés de l'azote ammoniacal et des nitrates sur GPS-X (---) et sur Matlab (—) et profils expérimentaux (■ : azote ammoniacal, ♦ : nitrates), correspondant au suivi intensif du 120^{ième} jour d'opération du RBS pilote	57
Figure 5.4	Profils de phosphore obtenus pour les concentrations de magnésium affluents simulées	63
Figure 5.5	Concentrations maximales simulées des composés de stockage des PAO (poly-P, PHA et glycogène) et du phosphore précipité (hydroxyapatite) en mg P/L et en mg DCO/L pour les concentrations affluents de magnésium simulées	63
Figure 5.6	Profils de phosphore simulés pour différentes concentrations d'acétate simulées (A : [HAc] < 1182 mg DCO/L ; B : [HAc] > 1182 mg DCO/L)	65
Figure 5.7	Concentrations maximales simulées des composés de stockage des PAO (poly-P, PHA et glycogène) et du phosphore précipité (hydroxyapatite) pour les concentrations affluents d'acétate simulées	66
Figure 5.8	Répartition des biomasses hétérotrophe et déphosphatante pour différentes concentrations d'acétate simulées (mg DCO/L)	66
Figure 5.9	Profils de phosphore obtenus pour les cycles d'opération du RBS simulés (A : cycles 1,2,3 et témoin; B : cycles 4,5,6,7 et témoin)	70
Figure 5.10	Concentrations maximales simulées des composés de stockage des PAO (poly-P, PHA et glycogène) et du phosphore précipité (hydroxyapatite) en mg DCO/L et en mg P/L pour les cycles d'opération du RBS simulés	71
Figure 5.11	Répartition des biomasses hétérotrophe et déphosphatante (en mg DCO/L) pour les cycles d'opération du RBS simulés	71
Figure 5.12	Profils d'azote ammoniacal obtenus pour les cycles d'opération du RBS simulés (A : cycles 1,2,3 et témoin; B : cycles 4,5,6,7 et témoin)	72
Figure 5.13	Profils de nitrates obtenus pour les cycles d'opération du RBS simulés (A : cycles 1,2,3 et témoin; B : cycles 4,5,6,7 et témoin)	73

Figure 5.14	Profils de phosphore obtenus pour les TRH simulés (A : TRH > 48 h ; B : TRH < 48 h).....	76
Figure 5.15	Concentrations maximales simulées des composés de stockage des PAO (poly-P, PHA et glycogène) et du phosphore précipité (hydroxyapatite) en mg DCO/L et en mg P/L pour les TRH simulés.....	77
Figure 5.16	Répartition des biomasses hétérotrophe et déphosphatante pour les TRH simulés.....	77
Figure 5.17	Profils d'azote ammoniacal obtenus pour les TRH simulés (A : TRH > 48 h; B: TRH < 48 h).....	78
Figure 5.18	Profils de nitrates obtenus pour les TRH simulés (A : TRH > 48 h; B: TRH < 48 h).....	79
Figure 5.19	Profils de phosphore obtenus pour les TRB simulés (A: TRB > 21 jours; B : TRB < 21 jours).....	82
Figure 5.20	Concentrations maximales simulées des composés de stockage des PAO (poly-P, PHA et glycogène) et du phosphore précipité (hydroxyapatite) en mg DCO/L et en mg P/L pour les TRB simulés.....	83
Figure 5.21	Répartition des biomasses hétérotrophe et déphosphatante (en mg DCO/L) pour les TRB simulés.....	83
Figure 5.22	Profils d'azote ammoniacal obtenus pour les TRB simulés (A: TRB > 21 jours, B: TRB < 21 jours)	84
Figure 5.23	Profils de nitrates obtenus pour les TRB simulés (A: TRB > 21 jours, B: TRB < 21 jours).....	85
Figure 6.1	Profils de phosphore obtenus par simulation pour différentes concentrations affluentes de magnésium (mg/L).....	93
Figure 6.2	Concentrations maximales du PHA (mg DCO/L), poly-P (mg P/L), glycogène (mg DCO/L) et du phosphore précipité (mg P/L) pour différentes concentrations affluentes de magnésium simulées.....	94

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

Acétyl CoA	Acétyl Co-enzyme A
AGV	Acides gras volatils
ASM1	Activated Sludge Model no.1
ASM2	Activated Sludge Model no.2
ASM3	Activated Sludge Model no.3
ATP	Adénosine triphosphate
Bio-P	Biological phosphorus (removal)
COD	Chemical oxygen demand
DCO	Demande chimique en oxygène
GAO	Glycogen Accumulating Organisms
GPS-X	General Purpose Simulator – X
HAc	Acétate (CH_3COOH)
HAP	Hydroxyapatite ($\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{OH}$)
HDP	Hydroxydicalcium phosphate ($\text{Ca}_2(\text{PO}_4)_3(\text{OH})_2$)
HRT	Temps de rétention hydraulique
IAWQ	International Association on Water Quality
MES	Matières en suspension
MVES	Matières volatiles en suspension
NADH	Nicotinamide adenine dinucleotide (forme réduite)
o-PO ₄	Orthophosphates
PAO	Phosphorus accumulating organisms
PHA	Poly-β-hydroxyalcanoate
PHB	Poly-β-hydroxybutyrate
PHV	Poly-β-hydroxyvalérate
poly-P	Polyphosphates
RBS	Réacteur biologique séquentiel
SBR	Sequencing batch reactor

SDI	Settle, Decant, Idle
SRT	Sludge retention time
TRB	Temps de rétention des boues
TUD	Technological University of Delft
UASB	Upflow anaerobic sludge blanket
VFA	Volatile fatty acids
XHET	Biomasse hétérotrophe
XPAO	Biomasse déphosphatante

LISTE DES ANNEXES

ANNEXE I DESCRIPTION DU MODÈLE A3TX INTÉGRÉ DANS LE “MODEL DEVELOPER”	110
A.1.1 Description du modèle A3TX.....	111
A.1.1.1 Matrice du modèle.....	111
A.1.1.2 Description des réactions du modèle A3TX	114
A.1.1.3 Description des fonctions de saturation et d’inhibition.....	115
A.1.2 Variables composites du modèle.....	116
A.1.3 Variables du modèle.....	117
A.1.3.1 Composés.....	117
A.1.3.2 Variables composites.....	118
A.1.3.3 Paramètres stoechiométriques et cinétiques.....	119
A.1.4 Variables de GPS-X.....	123
A.1.4.1 Librairie cnlib.....	123
A.1.4.2 Librairie cnplib.....	123
A.1.4.3 Librairie iplib.....	124
A.1.4.5 Librairie cn2iplib.....	124
A.1.4.6 Librairie csolib.....	124
A.1.4.7 Librairie openlib.....	124
A.1.4.8 Librairie totallib.....	125
A.1.5 Etapes d’utilisation du Model Developer.....	126
A.1.6 Information relative au modèle A3TX sous forme matricielle.....	127
A.1.7 Nomenclature.....	128
A.1.8 Remarques.....	129
+ Disquette jointe	

CHAPITRE I

INTRODUCTION

1.1 Problématique

1.1.1 Problèmes occasionnés par le phosphore

Le déversement du phosphore dans les cours d'eau provoque leur eutrophication, menant à la prolifération de certaines algues et plantes aquatiques. Bien que l'eutrophication soit aussi causée par le carbone et l'azote, le phosphore est l'élément limitant. Ainsi, il est important de le contrôler. Les normes au Québec préconisent, pour les industries, une concentration maximale de phosphore à l'effluent de 1 mg P/L ou alors un enlèvement de 98 %. Pour les municipalités, les normes tiennent compte des milieux récepteurs et varient de 0,4 à 0,8 mg P/L sur une base annuelle (0,5 à 1 mg P/L, sur une base mensuelle).

1.1.2 Avantages de la déphosphatation biologique

La méthode de déphosphatation la plus couramment utilisée est physico-chimique et consiste à utiliser des sels métalliques (de fer, d'aluminium, de calcium) pour faire précipiter le phosphore. Une autre méthode, la déphosphatation biologique se base sur les caractéristiques uniques de certaines bactéries capables d'accumuler le phosphore au-delà des besoins métaboliques de croissance (Comeau, 1990a). La déphosphatation biologique présente certains atouts:

- elle ne produit pas plus de boues qu'un procédé conventionnel,
- elle ne nécessite pas en général l'ajout de produits chimiques,
- elle peut être utilisée conjointement avec l'enlèvement de l'ammoniaque et de l'azote total (Kuba, 1996),

- elle permet d'obtenir des concentrations résiduelles en o-PO_4 aussi faibles que 0,1 mg P/L (Oldham, 1985),
- elle permet de réduire les besoins d'énergie d'aération jusqu'à 30 % (Randall *et al.*, 1992),
- elle peut être installée relativement aisément dans une station existante (Raymond *et al.*, 1991),
- elle générerait des boues plus facilement valorisables (Comeau, 1990a).

Diverses configurations de réacteurs sont utilisées pour enlever le phosphore. Dans ce projet, l'enlèvement du phosphore est modélisé pour un effluent agro-alimentaire traité par réacteur biologique séquentiel (RBS). Dans un RBS, l'alternance de conditions anoxie/anaérobie/aérobie est non pas réalisée dans l'espace, mais dans le temps.

1.1.3. Utilité de la modélisation

Un modèle précis, complet et fiable de boues activées facilite grandement la tâche des concepteurs et des opérateurs de stations d'épuration. Disposant d'un modèle, il devient possible de prévoir l'impact d'un changement des caractéristiques de l'affluent (par exemple: débits, charge, composition, type d'écoulement) et des paramètres d'opération (par exemple: âge des boues, température, taux de recirculation) sur la performance du système. En intégrant le modèle dans un logiciel informatique, une simulation et une optimisation du fonctionnement du système peuvent être effectuées. De plus, les modèles se sont avérés très utiles à la formation des opérateurs de station: par des exercices de simulation, les opérateurs acquièrent une expérience "instantanée" et peuvent juger de la réponse du système à divers changements dans les conditions d'opération. Afin d'obtenir la capacité prédictive la plus précise, il est important de choisir le modèle le plus complet.

1.2. Mise en contexte

1.2.1 Présentation du projet Agropur (Notre-Dame-du-Bon-Conseil, Québec)

La fromagerie Agropur située à Notre-Dame-du-Bon-Conseil, Québec, produit un effluent hautement chargé en phosphore qui est rejeté dans la rivière Nicolet fusionnant avec le fleuve St-Laurent. À la construction de l'usine, aucune norme de phosphore n'avait été imposée. Le traitement s'effectuait ainsi: un pré-dégrillage et un pré-dessablage permettait un traitement préliminaire des eaux usées brutes. L'effluent traversait ensuite un bassin tampon/acidogène, deux réacteurs anaérobies méthanogènes de type UASB (Upflow Anaerobic Sludge Blanket) opérés en parallèle, deux étangs aérés et enfin deux étangs de polissage avant rejet final à la rivière Nicolet.

En 1995, l'usine envisagea de modifier la configuration de son procédé afin de mettre en place un projet de valorisation de lactosérum. À cette occasion on exigea des normes de phosphore plus sévères. Les rejets de phosphore futurs furent évalués à 150 mg P/L (vs 100 mg P/L). Une réduction à la source devrait pouvoir réduire cette charge à la charge initiale. Cependant, pour satisfaire aux normes projetées, Agropur considéra deux solutions pour le traitement du phosphore: soit un traitement chimique, soit un traitement biologique. Comme un bassin acidogène produisait déjà des acides gras volatils, nécessaires à la déphosphatation biologique, cette dernière alternative fut favorisée.

L'École Polytechnique de Montréal reçut le mandat d'étudier la faisabilité de la déphosphatation biologique par réacteur biologique séquentiel et d'en évaluer le potentiel maximal. Les études furent réalisées à l'échelle laboratoire et à l'échelle pilote. À l'échelle laboratoire, le réacteur biologique séquentiel était alimenté par l'effluent provenant du bassin tampon de la station existante. À l'échelle pilote, dans un premier temps (période 1a), le RBS était alimenté du bassin d'alimentation avec l'effluent du bassin-tampon. Dans un deuxième temps (période 1b), le réacteur,ensemencé de

nouveau, fut alimenté avec la sortie du fermenteur pilote. L'installation à l'échelle-pilote est présentée à la figure 1.1.

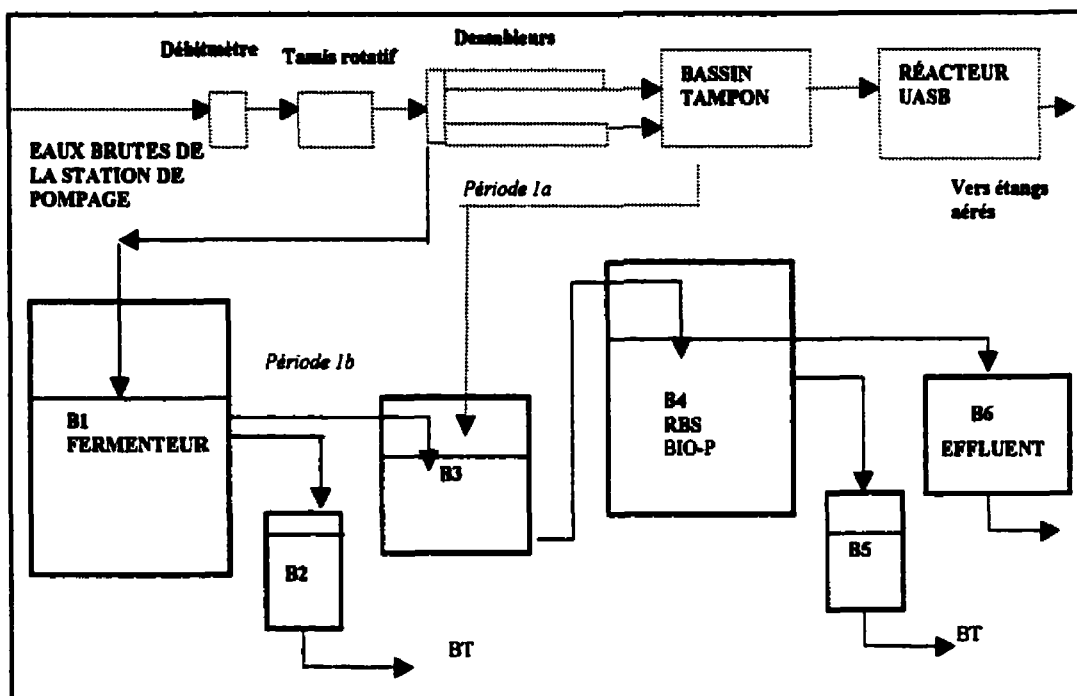


Figure 1.1 Schéma simplifié des procédés à l'échelle-pilote

Note: B2, B5 = réservoirs de rétention; B3 = bassin d'alimentation; BT = bassin tampon

À l'échelle laboratoire, la stabilité du procédé fut démontrée sur une période de 81 jours. Durant cette période, les capacités d'enlèvement se sont maintenues à 97%, pour la DCO, à environ 90 % pour l'azote total et entre 85 et 92 % pour les orthophosphates. Le pourcentage de phosphore contenu dans la biomasse atteignit 5,9 %, représentant environ 50 % du phosphore particulaire. Des bilans de masse permirent d'évaluer la fraction du phosphore précipité à environ 25-30 %.

À l'échelle pilote, durant la période 1a, la déphosphatation biologique ne put être maintenue. Au bout de 2 semaines d'opération, la fraction des poly-P dans la biomasse

atteignit une valeur maximale de 2 % (g P/g MES), et chuta à des valeurs négligeables par la suite. Les facteurs défavorables à la déphosphatation biologique ne purent être précisément identifiés. La consommation d'AGV en conditions anaérobies s'effectuait toujours, suggérant l'intervention de bactéries autres que les bactéries bio-P, telles que les bactéries GAO (Glycogen Accumulating Organisms) (Mino *et al.*, 1985; Satoh *et al.*, 1992). Par contre, durant la période 1b, au bout de 3 semaines, les poly-P atteignirent une fraction de 4 % (g P/g MVES), pour se maintenir à environ 3 % après 42 jours d'opération continue. Le pourcentage global d'enlèvement du phosphore total était de 88 %. La concentration résiduelle de phosphore total à l'effluent se maintint à environ 8 mg P/L. Des analyses de PHA furent effectuées et révélèrent un rapport PHA produits sur AGV accumulés proche de 2 mol C/mol C, suggérant ainsi la contribution d'une source interne de stockage de carbone supplémentaire, telle que le glycogène. L'efficacité d'enlèvement de la DCO totale avoisinait 97 %.

1.2.2 Étude de modélisation réalisée avec le modèle de Dold

Dans le cadre du projet Agropur, une étude de modélisation fut aussi effectuée (Desjardins, 1996). L'objectif de cette étude de modélisation visait à générer les résultats obtenus à l'échelle laboratoire et pilote afin d'assister la conception du procédé. La modélisation fut effectuée en reproduisant les conditions d'opération du RBS de laboratoire. Il fut décidé que les profils et valeurs visées seraient ceux du suivi intensif du 79^{ième} jour d'opération, alors que l'opération était relativement stable. Le logiciel GPS-X permet de réaliser les simulations. Le modèle utilisé était le modèle général de Dold (1991).

Malgré les ajustements effectués, les résultats finaux de modélisation montrent des écarts fort importants: le modèle ne prédit pas correctement la concentration de phosphore résiduelle à l'effluent. La concentration de phosphore résiduelle simulée est nulle, alors que la concentration expérimentale avoisine 6 mg P/L. La concentration en PHA prédite

par simulation est trop élevée: à la fin de la première période aérobie, la concentration de PHA prédite est de 2000 mg DCO/L alors que la concentration mesurée est quasiment nulle.

1.3 Objectifs

Alors que la plupart des modèles ont déjà fait leurs preuves sur des effluents synthétiques et des effluents municipaux, peu d'études ont porté sur la modélisation appliquée à des effluents industriels.

L'objectif principal de cette recherche consiste à modéliser l'enlèvement du phosphore de l'effluent d'Agropur en utilisant un modèle plus complet, qui rendrait mieux compte des phénomènes observés. Ainsi, les étapes nécessaires à l'atteinte de cet objectif sont les suivantes:

- *Proposer un modèle aussi complet que nécessaire basé sur la synthèse de modèles récents*

À la lumière des résultats de modélisation obtenus avec le modèle de Dold et des analyses de PHA, révélant un rapport PHA produits/AGV consommés de l'ordre de 2 mol C/ mol C, le modèle de déphosphatation biologique devrait absolument tenir compte des réserves intracellulaires de glycogène. Le modèle de Delft (Smolders *et al.*, 1995; Murnleitner *et al.*, 1997) paraît approprié. Une composante "précipitation" devrait aussi être ajoutée afin de tenir compte de la contribution importante de la précipitation à l'enlèvement du phosphore; en effet, à l'échelle pilote, la fraction de phosphore précipité à la fin d'un cycle avoisinait 40 %.

- *Tester et calibrer ce modèle sur l'effluent d'Agropur avec le logiciel Matlab*

La modélisation sera effectuée dans un premier temps sur le logiciel Matlab 5.3. Le modèle sera testé en reproduisant les conditions opérationnelles du réacteur biologique séquentiel-pilote. En effet, il est possible qu'un phénomène d'aération de surface dans le RBS de laboratoire ait pu fausser les résultats de modélisation. A l'échelle pilote, ce phénomène est minime.

- *Transposer le modèle sur le logiciel GPS-X*

Le modèle sera transposé sur le logiciel GPS-X (version 2.4.1). Ceci permettra de comparer les résultats obtenus sur Matlab et GPS-X. De plus, disposer du modèle sur GPS-X en permettra une plus grande accessibilité et facilitera éventuellement la réalisation d'analyses de sensibilité.

- *Réaliser une étude d'optimisation succincte du procédé sur GPS-X*

Une fois le modèle transposé sur GPS-X, l'effet d'un changement dans certaines variables (conditions affluentes, paramètres d'opération...) sera étudié afin de tester le modèle sur une gamme étendue de conditions et de définir les conditions optimales d'opération du procédé pour l'enlèvement du phosphore.

1.4. Organisation du mémoire

Ce mémoire de maîtrise décrit le cheminement poursuivi afin de modéliser l'enlèvement du phosphore d'un effluent industriel, les résultats obtenus sur les logiciels Matlab 5.3 et GPS-X 2.4.1, et les résultats d'une étude d'optimisation succincte menée sur GPS-X. Une partie introduction a présenté le contexte de cette étude ainsi que les objectifs de cette recherche.

Une revue de littérature rappellera brièvement les mécanismes de la déphosphatation biologique, les principaux modèles biochimiques et l'effort de modélisation mathématique réalisé pour rendre ces modèles applicables "sur le terrain".

Un chapitre-synthèse présentera la méthodologie utilisée ainsi qu'un résumé des chapitres subséquents, et les liens utiles à leur compréhension.

Un article intitulé : "Modelling of the biological phosphorus removal of a cheese factory effluent by an SBR" constitue le chapitre IV. Cet article décrit le modèle utilisé et les résultats de modélisation et de calibration obtenus à partir des données expérimentales obtenus à partir d'un suivi intensif correspondant à la période d'opération 1b du RBS-pilote.

Un objectif secondaire du projet consiste à étudier l'impact du changement d'une variable (concentrations affluents, paramètres opérationnels) sur la performance de la déphosphatation biologique. Les résultats de ces analyses de sensibilité sont présentés au chapitre V.

Le chapitre VI, intitulé "études complémentaires", met l'accent sur les aspects du modèle et de la calibration à améliorer, et suggère quelques pistes à poursuivre.

Enfin, une partie "conclusion et recommandations" dressera une mise au point sur les principales réalisations de ce projet et identifiera les aspects à approfondir.

CHAPITRE II

REVUE DE LITTÉRATURE

2.1. Conditions requises pour la déphosphatation biologique

2.1.1. Séquence anaérobie/aérobie

L'importance d'une séquence anaérobie/aérobie pour la croissance d'une biomasse déphosphatante fut reconnue en premier par Fuhs et Chen (1975), qui constatèrent que l'enlèvement du phosphore dans un processus de boues activées était favorisé après une nuit de période anaérobie (Comeau, 1990a). En conditions anaérobies, les bactéries déphosphatantes, nommées "bio-P" (Comeau *et al.*, 1986), accumuleraient des réserves de carbone en utilisant l'énergie provenant de l'hydrolyse de poly-P (polyphosphates) préalablement accumulés. En conditions aérobies, ces réserves de carbone pourraient alors être utilisées pour la croissance et les besoins énergétiques de ces bactéries bio-P. Les bactéries bio-P possèderaient cette unique caractéristique de double stockage d'énergie sous forme de poly-P et sous forme de carbone.

2.1.2 Présence d'acides gras volatils (AGV)

Le métabolisme de substrats organiques simples (acétate, propionate, butyrate) par les bactéries bio-P fut observée par Fuhs et Chen (1975). Ces acides gras seraient alors stockés en conditions anaérobies par les bactéries bio-P sous forme de PHA (polyhydroxyalcanoates), comme le propose l'étude de Marais *et al.* (1983). En conditions aérobies, l'enlèvement du phosphore dépendrait de cette capacité d'accumulation du PHA, et donc de la présence d'acides gras volatils. Les substrats les plus favorables à la déphosphatation biologique sont l'acétate et le propionate (Gerber *et al.*, 1986; Comeau *et al.*, 1987).

2.1.3 Exclusion de nitrates de la zone anaérobie

Les bactéries déphosphatantes sont de deux types: aérobies strictes ou dénitrifiantes. Ainsi, en conditions anoxies, les bactéries bio-P dénitrifiantes accumuleraient le phosphore tandis que les bactéries bio-P non dénitrifiantes relargueraient le phosphore. L'activité relative de ces deux groupes de bactéries déterminerait l'effet net sur l'accumulation du phosphore (Comeau, 1990a). Même si certaines bactéries bio-P sont dénitrifiantes, la présence de nitrates dans la zone anaérobie du procédé de déphosphatation est nuisible à la déphosphatation biologique. En effet, certaines bactéries dénitrifiantes mais non déphosphatantes pourraient consommer une partie des acides gras volatils qui autrement auraient pu être stockés par les bactéries déphosphatantes: par conséquent, la capacité d'enlèvement du phosphore diminuerait. Afin d'optimiser la déphosphatation biologique, il est donc essentiel de minimiser la présence de nitrates en zone anaérobie.

2.1.4 Exclusion des GAO (Glycogen Accumulating Organisms) de la zone anaérobie

Bien qu'il ait été démontré à grande échelle que le processus de déphosphatation biologique permettrait d'atteindre des concentrations très faibles de phosphore résiduel (Barnard *et al.*, 1985; Oldham, 1985; Ketchum *et al.*, 1989), de nombreuses études à l'échelle laboratoire ont montré que, dans certains cas, l'enlèvement du phosphore n'avait pas lieu (Fukase *et al.*, 1985; Cech et Hartman, 1990, 1993; Satoh *et al.*, 1992). Ceci serait dû à la présence de bactéries capables aussi de stocker des acides gras volatils en conditions anaérobies mais qui n'utiliseraient pas l'énergie fournie par l'hydrolyse des poly-P. Ceux-ci n'étant pas nécessaires aux réactions de la phase anaérobie, la consommation de phosphate en phase aérobie n'aurait pas lieu. L'utilisation du glycogène, comme source de molécules réductrices et comme source d'énergie par ces bactéries fut suggérée par Satoh *et al.* (1992). Ces bactéries GAO (glycogen accumulating organisms) telles que nommées par Cech et Hartman, pourraient être distinguées des bactéries déphosphatantes selon le test de Neisser: bien qu'aussi « positives » elles se

coloreraient au niveau de leurs parois cellulaires alors que les bactéries déphosphatantes se coloreraient au niveau de leurs inclusions de volutine. Ainsi, Cech et Hartman (1993) réalisèrent une expérience où ils montrèrent que les bactéries GAO étaient surtout prédominantes en présence de glucose, mais pourraient aussi compétitionner avec les bactéries bio-P en présence d'acétate et même sans glucose (Cech et Hartman, 1993). Afin d'optimiser la déphosphatation biologique, il est donc important d'identifier les facteurs favorisant la croissance des GAO. L'importance du rapport massique P/C à l'affluent sur le contrôle des GAO fut soulignée par Liu *et al.* (1996): un rapport de P/C élevé favoriserait la croissance des bactéries bio-P, alors qu'un faible rapport favoriserait la croissance des bactéries GAO.

2.2. Modèles biochimiques

2.2.1 Modèles biochimiques en conditions anaérobies

En phase anaérobie, l'acétate est stocké sous forme de PHB à l'intérieur des bactéries bio-P. À cette fin, l'acétate serait tout d'abord transformé en acétyl-CoA. Le transport de l'acétate à l'intérieur de la cellule requiert de l'énergie, et la transformation d'acétyl-CoA en PHB requiert des molécules réductrices, telles que les NADH. Deux explications ont été proposées pour identifier la source de cette énergie de transport et de ces molécules réductrices. La première (Comeau *et al.*, 1986) fait intervenir les poly-P et le cycle de Krebs. L'énergie de transport serait fournie par l'hydrolyse des poly-P: le gradient de pH, nécessaire pour que le transport de l'acétate puisse s'effectuer, pourrait être rétabli soit par l'utilisation directe des poly-P soit par leur utilisation indirecte, via la production d'ATP. L'énergie produite par les poly-P pourrait aussi être utilisée pour la transformation d'acétate en acétyl CoA. Les orthophosphates en excès seraient alors relâchés à l'extérieur de la cellule via une enzyme de transport contrôlée par le gradient de pH. Bien que normalement inhibé en conditions anaérobies, le cycle de Krebs pourrait, à partir d'une fraction de l'acétyl-CoA synthétisé à partir de l'acétate, fournir les molécules de NADH requises pour le stockage de PHB depuis l'acétate. Ces mécanismes sont

schématisés dans la figure 2.1 A. Le deuxième modèle (Mino *et al.*, 1985; Arun *et al.*, 1988) considère aussi que l'énergie requise pour la transformation de l'acétate en acétyl-CoA provient de l'hydrolyse des poly-P, mais propose une autre source de NADH: la dégradation du glycogène (par glycolyse), préalablement accumulé dans la cellule fournirait les NADH requis pour la transformation de l'acétyl-CoA en PHB.

Par la suite, des modèles (Wentzel *et al.*, 1989b; Smolders *et al.*, 1994a, 1994b, 1995) se ramifièrent à partir des précédents. Le modèle de Wentzel *et al.* (1989b) se rapproche de celui de Comeau *et al.* (1986) quant à la source de NADH provenant du cycle de Krebs, mais par contre, n'utilise pas le concept de rétablissement du gradient de pH grâce à l'énergie fournie par les poly-P (Comeau, 1990a). Smolders *et al.* (1994a, 1994b, 1995) développèrent un modèle considérant, comme les modèles de Mino *et al.* (1985) et d'Arun *et al.* (1988), que le glycogène fournit les NADH requis pour le stockage d'acétate sous forme de PHB. Ils établirent un bilan en ATP afin de conforter cette hypothèse. L'effet du pH est aussi inclus dans le modèle de Smolders *et al.* (1994a). En effet, les modèles de Comeau *et al.* (1986), Wentzel *et al.* (1989b) et Arun *et al.* (1988) prévoient chacun un rapport constant du phosphate libéré sur l'acétate consommé. Ceci semble logique, puisque la consommation d'acétate pour stockage et la dégradation des poly-P sont deux phénomènes couplés métaboliquement l'un à l'autre. Toutefois, Smolders *et al.* (1994a) firent remarquer que le rapport phosphore relargué/acétate consommé variait dans un intervalle de 0,25 à 0,75 P-mol/C-mol. Ils suggérèrent que la variation observée proviendrait de la différence de pH: à pH faible, le transport d'acétate nécessiterait moins d'énergie qu'à pH élevé.

Le modèle de Smolders *et al.* (1994a, 1994b, 1995) fut appliqué en conditions anoxies par Kuba *et al.* (1996). La seule différence entre conditions aérobies et anoxies provient du type d'accepteur final d'électrons. Murnleitner *et al.* (1997) montrèrent que les réactions de déphosphatation biologique en conditions anoxies et aérobies pouvaient être décrites par une cinétique et une stoechiométrie identiques, le rapport ATP/NADH (δ) étant le seul paramètre

différent pour les croissances aérobie et anoxie.

Les processus anaérobies de la déphosphatation biologique tels que décrits dans les modèles de Smolders *et al.* (1994a, 1994b, 1995) et de Murnleitner *et al.* (1997) sont présentés schématiquement à la figure 2.2A. Le rôle des ions métalliques (Mg^{2+} , K^+), nécessaires au co-transport du phosphore (Comeau *et al.*, 1987; Rickard et McClintock, 1992) y est aussi représenté. Une description plus détaillée des modèles de Smolders *et al.* et de Murnleitner *et al.* est effectuée dans la section 2.3.3.

2.2.2 Modèles biochimiques en conditions aérobies

Au début de la phase aérobie, les bactéries bio-P disposent d'une réserve importante de PHB et d'une quantité réduite de poly-P. Les substrats carbonés externes étant aussi consommés par la biomasse, les bactéries bio-P utiliseraient alors leurs réserves de PHB comme source d'énergie et de croissance. Selon Comeau *et al.* (1986), comme en présence d'oxygène, le rapport ATP/ADP dans la cellule augmente, la formation de poly-P, à partir d'ATP et de phosphates solubles captés de l'extérieur, pourrait avoir lieu. Les processus aérobies décrits par le modèle de Comeau *et al.* sont présentés à figure 2.1B. Pour les modèles prenant en considération le glycogène, la réaction de formation de glycogène à partir du PHA en conditions aérobies doit aussi être considérée. Le métabolisme aérobie de la déphosphatation biologique selon le modèle de Smolders *et al.* (1994a, 1994b, 1995) est représenté dans la figure 2.2 B

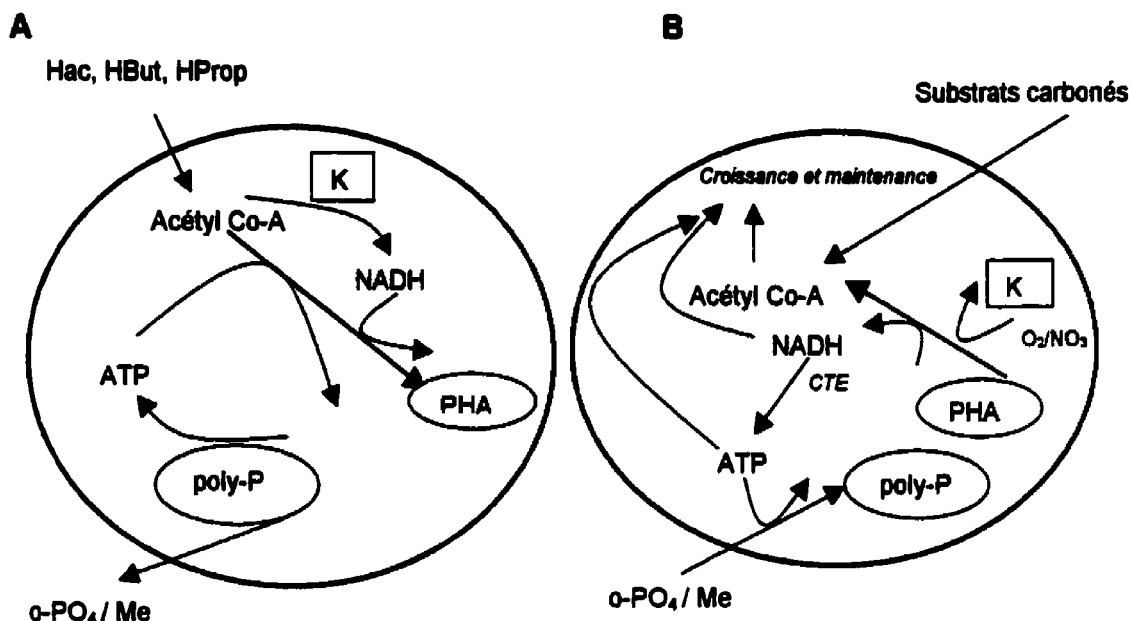


Figure 2.1 : Processus anaérobies(A) et aérobie(B) de la déphosphatation biologique selon Comeau *et al.* (1986) (CTE = chaîne de transporteurs d'électrons, K: cycle de Krebs, Me: métaux (K^+ , Mg^{2+}))

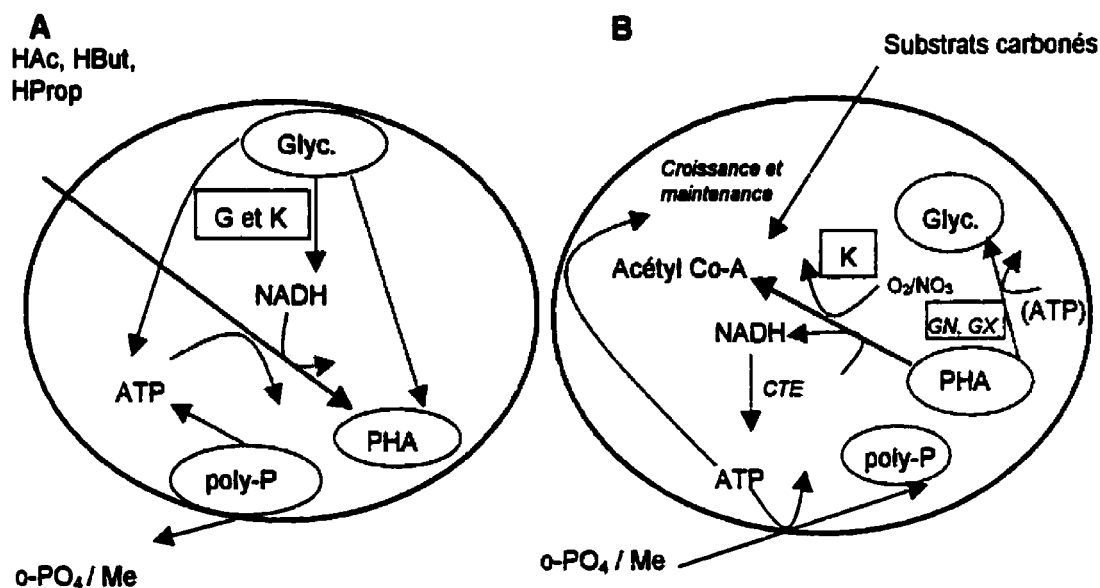


Figure 2.2: Processus anaérobies(A) et aérobie(B) de la déphosphatation biologique selon Smolders *et al.* (1994a, 1994b, 1995) (glyc.: glycogène, K: cycle de Krebs, G: glycolyse, GN: gluconeogenèse, GX: "glyoxylate cycle" Me: métaux (K^+ , Mg^{2+}))

2.3 Modélisation mathématique

2.3.1. Modèles décrivant l'enlèvement du carbone et de l'azote (ASM1 et ASM3)

En 1982, l'IAWQ (International Association on Water Quality), formait un groupe d'études chargé de réviser les modèles mathématiques qui incorporent les étapes d'enlèvement de la matière organique, de la nitrification et de la dénitrification (Dold, 1990, 1991). Il en résulta la formation d'un modèle, présenté sous forme matricielle, incluant les composés suivants:

- La matière organique subdivisée en quatre groupes: matière organique soluble inerte (S_i), substrat rapidement biodégradable (S_s), matière organique particulaire inerte (X_i), substrat (particulaire) lentement biodégradable (X_s),
- La biomasse, distinguée en 3 composantes: biomasse hétérotrophe active ($X_{B,H}$), biomasse autotrophe active ($X_{B,A}$), produits particuliers provenant de la décomposition de la biomasse (X_p),
- L'azote, séparé en quatre composantes: nitrates et nitrites (S_{NO}), azote ammoniacal (S_{NH}), azote organique soluble biodégradable (S_{ND}), azote organique particulaire biodégradable (X_{ND}).

Les principales réactions considérées sont:

- Pour les réactions de croissance: la croissance aérobie des hétérotrophes, la croissance anoxie des hétérotrophes, la croissance aérobie des autotrophes.
- Pour les réactions de décomposition: la décomposition des hétérotrophes, la décomposition des autotrophes, l'ammonification de l'azote organique soluble, l'hydrolyse des matières organiques particulières lentement biodégradables et l'hydrolyse de l'azote organique particulaire biodégradable.

Le modèle qui en résulta (Activated Sludge Model no.1 ou ASM1) se révéla très utile pour décrire de manière fiable et réaliste le comportement des systèmes de traitement pour diverses conditions d'opération, configurations, caractéristiques des eaux usées et paramètres d'opération. Il permet de prévoir l'impact de changements opérationnels (variation dans le débit et dans la charge), de modifications du mode d'opération et du schéma d'écoulement dans la station sur le procédé de traitement. (Dold, 1991).

En 1999, l'IAWQ développa le modèle ASM3 (Activated Sludge Model no.3) qui diffère du modèle ASM1 sur les points suivants :

- Une importance moindre est accordée aux réactions d'hydrolyse,
- Les composés solubles et particulaires tels que définis dans le modèle peuvent être différenciés plus facilement de manière expérimentale, par la filtration à travers une membrane de 0,45 μm ,
- Le concept de "death-regeneration" est remplacé par le concept de respiration endogène,
- Des réactions de stockage par les hétérotrophes en conditions aérobies sont modélisées.

Les processus métaboliques des modèles ASM1 et ASM3 sont présentés dans les figures 2.3 et 2.4.

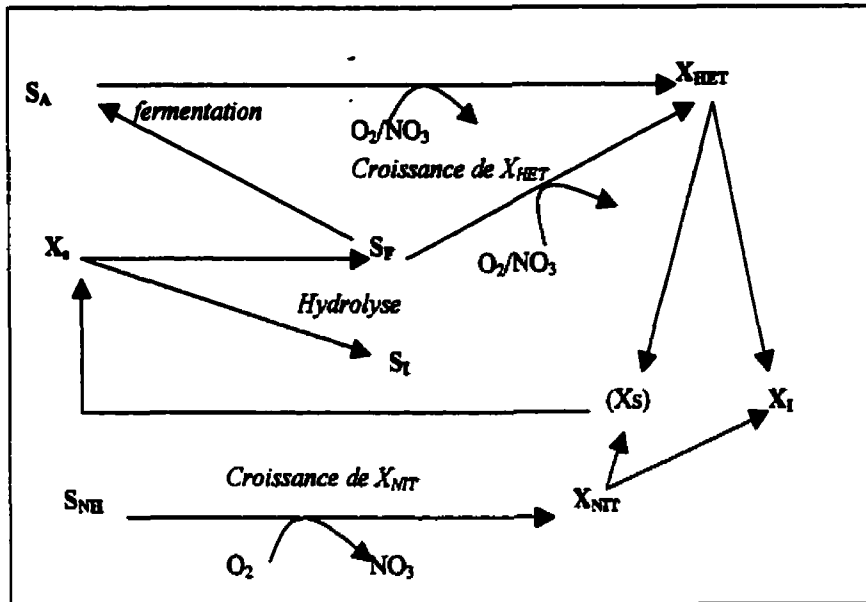


Figure 2.3 Processus du modèle ASM1

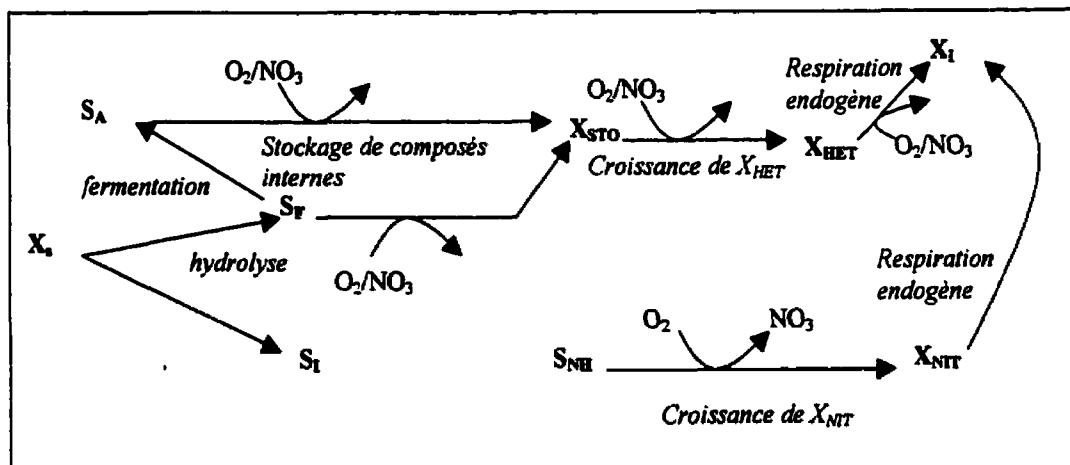


Figure 2.4 Processus du modèle ASM3

2.3.2 Modèles de Dold et modèle ASM2

Un modèle de déphosphatation biologique, basé sur des cultures enrichies de bactéries déphosphatantes, fut développé par Wentzel *et al.* (1989b): le type de bioréacteur utilisé étant un réacteur à écoulement continu, le seul substrat organique fourni étant l'acétate, et la liqueur

mixte du bioréacteur étant composée à 90 % de bactéries déphosphatantes *Acinetobacter*. Suite à des expériences en continu et en cuvée, Wentzel *et al.* furent en mesure de développer un modèle cinétique décrivant la déphosphatation biologique. Le modèle de Wentzel *et al.* se rapproche de celui de Comeau *et al.* (1986), concernant le concept de production des NADH requis pour le stockage d'acétate par l'intermédiaire du cycle de Krebs mais diffère quant à son identification de la source d'énergie requise pour le transport de l'acétate. Les protons proviendraient de la solution et le transport de l'acétate s'effectuerait par diffusion passive. La construction du modèle de Wentzel *et al.* s'apparente à celle du modèle ASM1. Ces deux modèles sont basés sur des coefficients cinétiques et stœchiométriques, et font appel à des « fonctions de transformation ». Jugeant de leur similarité et de leur complémentarité, Dold (1990, 1991) proposa de fusionner les modèles ASM1 et de Wentzel *et al.*. Toutefois, il suggéra certaines modifications soulignant l'importance d'appréhender correctement le rôle de nitrates dans les procédés de déphosphatation biologique. En effet, de nombreuses expériences montrent que les nitrates pourraient jouer un rôle important dans le processus d'enlèvement du phosphore (Hascoet *et al.*, 1985; Comeau *et al.*, 1987). Dold jugea les justifications de Wentzel insuffisantes concernant le fait de négliger la déphosphatation par les bactéries dénitrifiantes et rajouta donc dans son modèle une composante tenant compte de ce phénomène. Le modèle ASM1 fut aussi légèrement modifié afin de tenir compte des réactions impliquées dans le processus de déphosphatation biologique. Dold y rajouta les composantes suivantes: l'approvisionnement d'azote pour la synthèse cellulaire, la transformation de la matière organique facilement biodégradable en acides gras volatils, et la croissance des bactéries hétérotrophes non déphosphatantes sur les acides gras volatils.

Dold montra que les valeurs prédites par son modèle concordaient assez bien avec les valeurs expérimentales rencontrées dans les trois cas suivants: réacteur aérobie traitant des eaux usées urbaines, procédé UCT (University of Cape Town) avec affluent d'acétate, et enfin procédé UCT avec des eaux usées urbaines comme affluent. Le modèle « Activated Sludge Model no.2 » ou ASM2 (1995), qui permet de décrire l'oxydation de la matière organique,

l'enlèvement de l'azote par nitrification – dénitrification, et la déphosphatation biologique et chimique, s'apparente au modèle de Dold, excepté pour ces points :

- le modèle de Dold tient compte du stockage des poly-P pendant la réaction de croissance des bactéries déphosphatantes alors que le modèle ASM2 dissocie ces deux réactions,
- le modèle de Dold tient compte de la croissance des bactéries déphosphatantes en conditions anoxiques, et non le modèle ASM2,
- selon le modèle de Dold, les bactéries déphosphatantes en décroissance forment des matières inertes solubles alors que selon le modèle ASM2 elles forment du substrat particulaire. (Desjardins, 1996).

Récemment, l'IAWQ développa le modèle ASM2D (Gujer *et al.*, 1999) qui tient compte des bactéries déphosphatantes et dénitrifiantes.

2.3.3 Modèle TUD (Technological University of Delft)

2.3.3.1 Modèle de Smolders *et al.* (1994a, 1994b, 1995)

Le modèle de Dold n'incorpore pas le rôle du glycogène dans la déphosphatation biologique. Toutefois, il a déjà été mentionné que ce composé pourrait jouer un rôle important dans la déphosphatation biologique: selon Mino *et al.* (1987) et Arun *et al.* (1988), la dégradation du glycogène par glycolyse (ou par la voie métabolique de Embden-Meyerhoff-Paranas) fournirait les NADH nécessaires pour la conversion de l'acétyl-CoA en PHB. Smolders *et al.* soutiennent cette dernière hypothèse: selon eux, l'incorporation du métabolisme du glycogène pourrait expliquer de manière satisfaisante les phénomènes observés. Ils réalisèrent une expérience en réacteur biologique séquentiel (Smolders *et al.*, 1994a) d'où ils déterminèrent un rapport PHB/HAc de 1,2 C-mol/C-mol. Ils justifèrent ce rapport élevé par l'intervention d'une source interne de carbone. Ils confortèrent cette hypothèse par les résultats d'une analyse au microscope électronique, qui révéla des inclusions de glycogène dans les bactéries bio-P et par la quantité de dioxyde de carbone produite, correspondant au métabolisme du glycogène. Ils

montrèrent aussi que le rapport du phosphate libéré à l'acétate consommé en phase aérobie variait en fonction du pH, et expliquèrent cette variation par l'effet du pH sur la quantité d'énergie nécessaire pour le transport d'acétate à l'intérieur des bactéries. Enfin, un bilan en ATP leur fournit un argument supplémentaire en faveur des hypothèses mentionnées précédemment.

Smolders *et al.* (1994a, 1994b, 1995) développèrent par la suite un modèle métabolique décrivant la stoechiométrie en phases anaérobie et aérobie ainsi que la cinétique du processus de déphosphatation biologique. Ce modèle diffère de celui de Wentzel *et al.* (1989b) car il incorpore « la dynamique des composés de stockage et de la biomasse active ». En exploitant les relations stoechiométriques, le nombre de relations cinétiques peut être minimisé.

La phase anaérobie est décrite par deux réactions: la consommation de l'acétate et la production d'énergie nécessaire aux réactions endogènes (« maintenance »).

L'énergie requise pour le transport et le stockage de l'acétate serait fournie par l'hydrolyse des poly-P et la dégradation du glycogène et serait fonction du pH extracellulaire. L'hydrolyse des poly-P fournirait aussi l'énergie de maintenance.

La phase aérobie est décrite par quatre réactions: la synthèse de la biomasse, la consommation de phosphate, la formation de glycogène et la production d'énergie nécessaire aux réactions endogènes. Dans toutes ces réactions, le PHB est utilisé comme substrat. Smolders *et al.* montrèrent que la stoechiométrie, en conditions aérobies, pouvait être décrite par seulement trois coefficients métaboliques: le rapport P/O, (δ) qui représente la quantité d'ATP produit par phosphorylation oxydative, le coefficient de polymérisation (K) pour la synthèse de la biomasse, qui représente la quantité d'ATP impliquées dans la synthèse de la biomasse, et le coefficient de transport (ϵ) qui représente la quantité d'énergie mobilisée dans le transport du phosphate à l'intérieur de la cellule. Ils déterminèrent ces coefficients en se basant sur le fait que

toutes les réactions de conversion (croissance, formation de poly-P et formation de glycogène) étaient couplées à la consommation en oxygène, l'ATP étant produit par phosphorylation oxydative. Connaissant ces trois coefficients, tous les autres taux de conversion peuvent être déterminés.

2.3.2.2. *Modèle de Murnleitner et al. (1997)*

Kuba *et al.* (1996) adaptèrent le modèle de Smolders *et al.* pour des conditions anoxies. Murnleitner *et al.* (1997) montrèrent que les réactions de déphosphatation biologique en conditions aérobies et anoxies pouvaient être décrites par la même cinétique et la même stoechiométrie, la seule différence provenant du rapport ATP/NADH (δ). Afin de réaliser cette intégration, Murnleitner *et al.* reformulèrent le modèle quant à la base des équations cinétiques; en effet, dans le modèle de Smolders *et al.*, les équations cinétiques de base décrivent la formation de produits, la consommation de PHA étant la résultante. Dans le modèle de Murnleitner *et al.*, plus d'importance est accordée aux réactions de stockage des composés internes des PAO. Les réactions de base sont celles concernant le stockage des poly-P, du glycogène et du PHB, alors que la croissance de la biomasse n'est qu'une résultante de ces réactions.

2.3.3. **Modélisation de la précipitation du phosphore avec des métaux**

L'enlèvement biologique du phosphore peut se produire conjointement avec la précipitation du phosphore avec des métaux. En effet, le relargage anaérobie de phosphore résulterait en une augmentation de la concentration de phosphore qui induirait une précipitation simultanée avec ces métaux. Ceux-ci peuvent être ajoutés sous forme de coagulants à base de fer et d'aluminium. Le phosphore précipite alors avec des complexes formés par les hydroxydes de ces métaux, pour former des précipités cristallins (ex : $\text{Fe}(\text{PO}_4) \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $\text{Al}(\text{PO}_4) \cdot \text{H}_2\text{O}$). Ceci est

considéré dans le modèle ASM2 par l'inclusion d'une réaction de précipitation du phosphore avec l'hydroxyde de fer $\text{Fe}(\text{OH})_3$.

Toutefois, même sans l'ajout de coagulants, il fut observé que dans les stations de traitement opérant avec la déphosphatation biologique, une partie du phosphore était enlevé par précipitation chimique (Fuhs and Chen, 1975, ; Mino *et al.*, 1985, Appeldoorn *et al.*, 1992). Le phosphore précipiterait avec des ions calcium pour former de l'hydroxyapatite ($\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{OH}$). Maurer *et al.* (1999) proposèrent un modèle basé sur trois équations pour décrire la précipitation calcique du phosphore. La première réaction consiste en la précipitation du phosphore avec les ions calcium pour donner un précipité intermédiaire d'hydroxycalciumdiphosphate (HDP), de formule $(\text{Ca}_2(\text{PO}_4)_3(\text{OH})_2)$. La deuxième réaction consiste en la redissolution du HDP, et enfin la troisième réaction en la formation d'hydroxyapatite à partir de HDP. Maurer *et al.* (1999) soulignent que les processus de précipitation de phosphore dépendent d'une variété de facteurs, tels que les concentrations de phosphore et de calcium, le pH et la température, et la configuration hydraulique du procédé.

2.3.5 Intégration de modèles pour applications à grande échelle

Le modèle TUD (Smolders *et al.*, 1994a, 1994b, 1995 ; Murnleitner *et al.*, 1997) a été validé avec des données de laboratoire obtenues à partir de réacteurs biologiques séquentiels et de cultures enrichies de biomasse déphosphatante, à une température de 20°C. Peu d'études ont porté sur le potentiel prédictif de ce modèle tel qu'appliqué à des effluents municipaux ou industriels. Brdjanovic (1998) réalisa des études de modélisation sur une station d'épuration municipale en utilisant une combinaison du modèle ASM2 et du modèle TUD. Il montra qu'avec un nombre minimal d'ajustements sur certains paramètres du modèle TUD (taux de fermentation, taux de synthèse du glycogène en conditions aérobies, coefficient de réduction en conditions anoxies), les processus de déphosphatation biologique pouvaient être raisonnablement prédits.

CHAPITRE III

SYNTHÈSE

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, une synthèse détaillée des chapitres IV et V est présentée. Le chapitre IV constitué par l'article "Modelling of the biological phosphorus removal of a cheese factory effluent by an SBR" décrit le modèle utilisé et les étapes de calibration réalisées à partir de données expérimentales du RBS pilote. Afin de faciliter la compréhension de ce chapitre, son contenu sera repris ici en détail, et les aspects abordés rapidement y seront couverts de façon plus détaillée. Le chapitre V décrit les résultats d'analyses de sensibilité effectuées sur GPS-X. Comme le magnésium et l'acétate sont deux composés essentiels à la bio-P, l'effet du changement de leurs concentrations affluentes sur l'enlèvement du phosphore y fut étudié. L'influence de la cyclologie d'opération du RBS, du TRH et du TRB sur l'enlèvement du phosphore, et dans une moindre mesure, sur l'enlèvement de l'azote, y est également étudié. Comme le chapitre V est déjà exhaustif, seulement un résumé en sera présenté. Le chapitre VI constitue en une revue succincte des aspects du modèle et de la calibration à améliorer. Son contenu y est ici brièvement exposé.

3.2 Développement et mise en application du modèle avec les données d'Agropur (synthèse du chapitre IV et liens utiles)

3.2.1 Modèles

Le modèle de déphosphatation biologique utilisé est le modèle TUD (Smolders *et al.*, 1995; Murnleitner *et al.*, 1997; Brdjanovic *et al.*, 1998). Ce modèle incorpore la dynamique des composés de stockage des PAO, incluant le glycogène. À la différence des modèles de Dold et du modèle ASM2, développés comme des modèles paramétriques, le modèle TUD repose sur des équations dérivées du métabolisme des PAO. Ainsi, ses paramètres devraient être ajustés au minimum. Brdjanovic (1998) utilisa ce modèle sur les données d'un effluent municipal, à grande échelle; avec seulement trois ajustements sur les paramètres, le modèle montra un potentiel prédictif très satisfaisant pour le phosphore.

Le modèle d'enlèvement du carbone et de l'azote utilisé est le modèle ASM3 (Gujer *et al.*, 1995). Les différences entre les modèles ASM1 et ASM3 concernent essentiellement la modélisation des phénomènes de décroissance de la biomasse. Le modèle ASM1 privilégie la description de cette décroissance par une réaction d'hydrolyse s'effectuant en conditions anaérobies, aérobies et anoxies alors que le modèle ASM3 utilise le concept de respiration endogène. Pour cela, le modèle ASM3 s'apparente plus au modèle TUD, et il fut donc jugé plus "logique" de réaliser la synthèse de ces deux modèles.

La répartition des formes du phosphore, à l'échelle laboratoire ou à l'échelle pilote, montre une contribution importante de la précipitation à l'enlèvement du phosphore, de l'ordre de 30 à 50 %. La concentration élevée de calcium à l'effluent (environ de 80 mg /L) à l'échelle-pilote suggère la formation d'hydroxyapatite. Pour modéliser la précipitation calcique du phosphore, le modèle proposé par Maurer *et al.* (1999) fut utilisé.

Le tableau 4.1 et la figure 4.1 présentés au chapitre IV présentent une liste sommaire des réactions du modèle synthèse (nommé A3TX) et un schéma des processus métaboliques. Une matrice du modèle ainsi qu'une liste des paramètres stœchiométriques et cinétiques, accompagnée de leurs valeurs et de leur source, est présentée en annexe I.

3.2.2 Logiciels de modélisation

Tout d'abord, pour la calibration du modèle A3TX sur les données de l'effluent d'Agropur, l'opération du RBS-Pilote fut simulée avec le logiciel Matlab 5.3: la structure de programmation utilisée s'inspire de celle développée par Larose (1998). "ODE23s" fut la méthode de résolution utilisée pour résoudre les équations différentielles. Les programmes de simulation sont présentés à l'annexe II.

Le modèle développé sur Matlab 5.3 fut transposé dans le logiciel GPS-X 2.4.1 à l'aide d'un outil récemment développé, nommé "Model Developer". Cet outil permet la génération de modèles dans un code (ACSL) directement utilisable dans GPS-X à partir de macros Visual Basic insérées dans Excel. Le modèle doit être écrit sous forme d'une matrice Peterson (Wentzel *et al.*, 1989b). Les variables, les paramètres et les fonctions de transformation du modèle sont définies dans des feuilles adjacentes. Une description plus détaillée du Model Developer est effectuée en annexe I.

3.2.3 Conditions expérimentales

Les caractéristiques de l'affluent, les conditions d'opération et la cyclologie d'opération du RBS-pilote sont présentés aux tableaux 4.2, 4.3 et 4.4.

Les données expérimentales utilisées correspondent à un suivi intensif obtenu sur la période 1b du fonctionnement du RBS pilote. Les suivis intensifs de la période 1a ne furent pas utilisés, la déphosphatation biologique s'étant dégradée au bout de 23 jours. Le suivi intensif de la cent-vingtième journée d'opération du RBS-pilote correspond à une période assez stable d'opération sur une base d'enlèvement de la DCO, des MVES et du phosphore.

3.2.4 Adaptation du modèle aux conditions expérimentales d'Agropur

Dans un premier temps, aucun ajustement ne fut effectué, que ce soit sur la structure du modèle ou sur les valeurs des paramètres. Les résultats obtenus avec le modèle non ajusté sont présentés au tableau 4.2 et à la figure 4.2. L'écart entre les valeurs simulées et expérimentales est très important, tout particulièrement pour le profil de phosphore, comme le montre la figure 4.2. La quantité de phosphore relargué en conditions anaérobies est considérablement surestimée, et un recaptage total de phosphore est prédit alors qu'expérimentalement, la concentration résiduelle de phosphore est d'environ 8 mg P/L.

L'observation des profils expérimentaux de phosphore et de magnésium montre un ralentissement du taux de recaptage du phosphore quand la concentration de magnésium s'approche de 0. De nombreuses expériences (Comeau *et al.*, 1987; Rickard et McClintock, 1992) indiquent que les ions magnésium seraient co-transportés avec le phosphore, et donc, absolument nécessaires à la déphosphatation biologique. Afin de tenir compte de l'effet d'une carence de magnésium, une fonction de type Monod fut

incluse dans les équations du taux de synthèse aérobie/anoxie des polyphosphates. La constante de saturation K_{Mg} fut évaluée à 10 mg/L, comme le montre la figure 3.1. La relation stœchiométrique entre le phosphore et le magnésium fut déterminée expérimentalement à 0,157 g Mg/g P, tel que présenté à la figure 3.2.

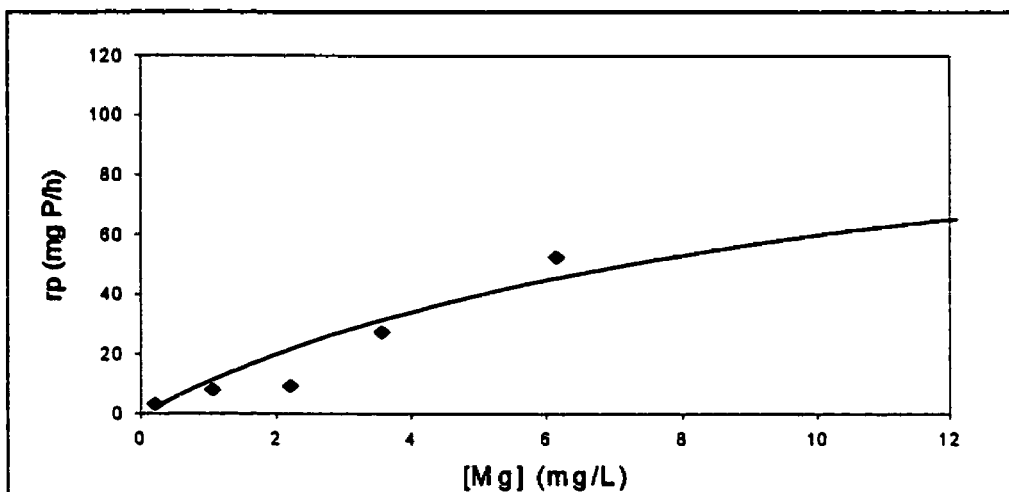


Figure 3.1 Relation entre le taux de recaptage de phosphore (r_p) et la concentration en magnésium (♦ : données expérimentales, — : fonction Monod d'équation $r_p = 120 * [Mg] / ([Mg] + 10)$) pour le suivi intensif correspondant au 120^{ème} jour d'opération du RBS pilote

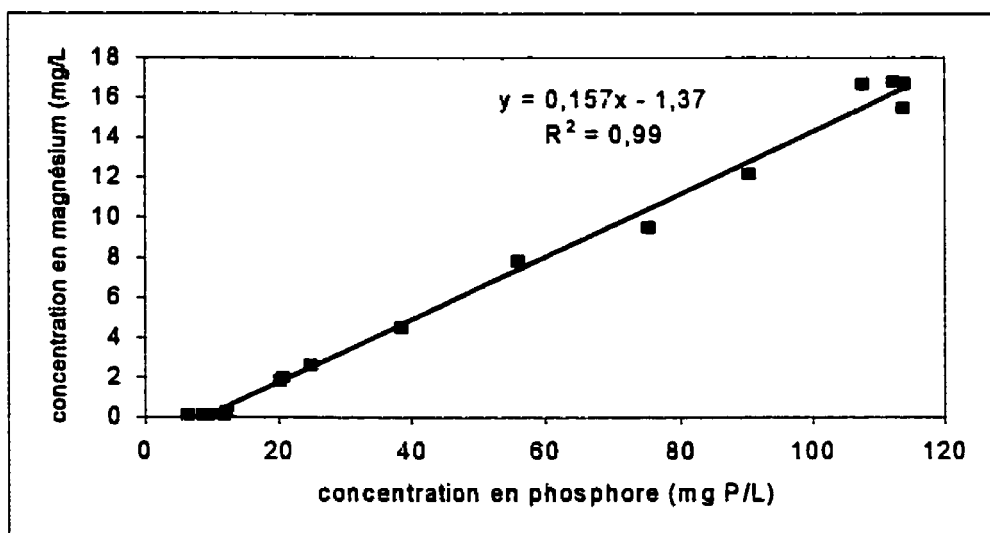


Figure 3.2 Relation entre les concentrations expérimentales de magnésium et de phosphore (♦ : données expérimentales, — : droite de régression) pour le suivi intensif correspondant au 120^{ème} jour d'opération du RBS pilote

3.2.5 Calibration

Une liste des paramètres ajustés ainsi que l'effet de leur ajustement, sont présentés dans le tableau 4.5. Quatre paramètres furent donc ajustés: le rapport Y_{PO4} (phosphore relargué sur acétate consommé), les coefficients de rendement Y_{PHAO} et Y_{PHANO} (PHA consommé sur biomasse formée en conditions aérobies et en conditions anoxies) et enfin, le taux de stockage aérobie des poly-P, k_{PP} . Il est difficile de justifier un ajustement si important de Y_{PO4} . La présence de GAO, qui stockeraient des AGV sous forme de PHA en conditions anaérobies, sans que des réserves de poly-P soient impliquées, pourrait expliquer en partie que le rapport Y_{PO4} observé soit inférieur au rapport théorique. De plus, seul l'acétate est considéré dans le modèle TUD. Or, l'effluent du fermenteur-pilote est constitué à environ 40 % d'autres AGV (propionate et butyrate). Cette difficulté fut occultée en supposant que la totalité des AGV était constituée d'acétate. Par ailleurs, la relation reliant Y_{PO4} au pH est normalement valide pour de l'acétate. Certaines études (Abu-Ghararah et Randall, 1991) suggèrent que ce rapport serait moins élevé pour les autres AGV. Ces hypothèses, néanmoins, ne pourraient qu'expliquer l'écart entre les rapports expérimental et théorique. Les raisons de la surestimation de la quantité de phosphore relargué par le modèle A3TX appliqué à l'effluent spécifique d'Agropur n'ont pu être clairement identifiées.

Le taux de synthèse aérobie/anoxie des poly-P fut diminué de sa valeur par défaut de 0,11 g P consommé/g X_{PAO} -DCO/d à 0,07 g P/g DCO/d afin d'obtenir une meilleure concordance entre les cinétiques de recaptage aérobie du phosphore simulée et expérimentale.

Enfin, les coefficients stœchiométriques Y_{PHAO} et Y_{PHANO} (PHA consommé sur biomasse formée, en conditions aérobies et anoxies) furent respectivement augmentés de 1,44 g PHA-DCO/g X_{PAO} à 1,78 g PHA-DCO/g X_{PAO} et de 1,76 g PHA-DCO/g X_{PAO} à 2,2 g

PHA-DCO/g X_{PAO} . Cet ajustement fut effectué afin de réduire le taux d'accumulation de la biomasse déphosphatante. Sans ajustement, la concentration en biomasse déphosphatante atteint une valeur stationnaire de plus de 4000 mg DCO/L. A cette concentration, le taux de recaptage aérobie du phosphore est si important que la fonction Monod tenant compte de l'effet d'une carence en magnésium ne semble pas avoir d'effet.

3.2.6 Résultats finaux

3.2.6.1 Résultats obtenus avec le logiciel Matlab 5.3

Suite à ces ajustements, le profil final de phosphore suit assez bien le profil expérimental, tel que présenté à la figure 4.2. Le profil des composés de stockage des PAO est présenté dans la figure 4.3. La quantité de PHA est assez bien prédite alors que la consommation de PHA est légèrement surestimée. À la fin de la première période aérobie, la concentration résiduelle de PHA simulée est nulle, alors qu'expérimentalement elle est d'environ 50 mg DCO/L. La concentration de poly-P simulée à la fin du cycle correspond à la concentration expérimentale. La concentration de glycogène prédite à la fin d'un cycle atteint environ 300 mg DCO/L. Faute de données expérimentales pour le glycogène, la qualité prédictive du modèle pour ce composé ne put être évaluée. La concentration d'hydroxyapatite simulée atteint 215 mg P/L à la fin d'un cycle, ce qui est supérieur à la concentration estimée à 160 mg P/L au jour 120.

La DCO simulée diminue d'une valeur initiale de 450 mg DCO/L à 48 mg DCO/L, tel qu'observé expérimentalement. Néanmoins, la consommation d'AGV simulée est totale alors qu'à la fin d'un cycle, la concentration expérimentale résiduelle est de 11 mg DCO/L. La concentration de MVES prédite dans la liqueur mixte à la fin du cycle est de 6430 mg MVES/L, ce qui est supérieur à la concentration expérimentale de 4780 mg MVES/L.

Comme présenté à la figure 5.3, la quantité maximale d'azote ammoniacal prédite est surestimée, ainsi que la quantité de nitrates produite lors de la phase O₂-1. De plus, une nitrification se produit durant la dernière phase aérobie alors qu'expérimentalement, la concentration en nitrates demeure nulle.

3.2.6.2 Résultats obtenus sur le logiciel GPS-X 2.4.1

Les simulations menées sur le logiciel GPS-X, en incluant les mêmes ajustements, donnent des résultats assez comparables. Cependant, quelques différences doivent être soulignées. Bien que les concentrations résiduelles de phosphore soient similaires, la quantité de phosphore relarguée simulée sur GPS-X est supérieure à celle simulée sur Matlab (cf. figure 5.1). La concentration maximale de PHA obtenue sur GPS-X est légèrement supérieure à celle obtenue sur Matlab (660 mg DCO/L vs 600 mg DCO/L). De plus, la concentration simulée de poly-P (400 mg P/L) atteinte à la fin de la première phase aérobie est bien plus importante que celle simulée sur Matlab (250 mg P/L). Sur GPS-X, la concentration d'hydroxyapatite atteinte à la fin d'un cycle coïncide avec la concentration estimée sur le suivi du jour 120 (160 mg P/L).

Une différence entre les deux logiciels concernent aussi les profils simulés de l'azote ammoniacal et des nitrates (cf. Figure 5.3); la concentration maximale atteinte d'azote ammoniacal est légèrement supérieure sur GPS-X. Par contre, sur GPS-X, la quantité de nitrates produits est bien moindre (et inférieure à la quantité de nitrates produits expérimentalement, pour le 120^{ième} jour d'opération du RBS-pilote).

3.2.6.3 Conclusion

Ainsi, il fut montré qu'un modèle utilisé plus couramment sur des effluents synthétiques et municipaux avait un potentiel intéressant de prédiction de l'enlèvement du phosphore d'un effluent industriel, à condition d'inclure un terme tenant compte des conditions spécifiques expérimentales (c-a-d: carence en magnésium) et d'effectuer certains

ajustements sur les paramètres par défaut. Avec la même calibration, les résultats obtenus entre les deux logiciels sont globalement similaires mais divergent sur certains points, notamment la prédiction des concentrations maximales de poly-P et de phosphore précipité.

3.3 Analyses de sensibilité réalisées sur GPS-X (résumé du chapitre V)

L'objectif des analyses de sensibilité visait à tester le modèle sur une gamme étendue de conditions et à définir certaines conditions optimales d'opération pour l'enlèvement du phosphore. Tout d'abord, l'effet d'un changement des concentrations affluentes de magnésium et d'acétate sur l'enlèvement du phosphore fut étudié. Par la suite, l'effet de diverses conditions d'opération sur l'enlèvement du phosphore et de l'azote fut testé.

3.3.1 Analyses de sensibilité effectuées sur les concentrations affluentes

3.3.1.1 Concentrations affluentes de magnésium

D'après le modèle, l'enlèvement du phosphore est total à une concentration de magnésium affluente de 15 mg /L. Cependant, le modèle prédit que la déphosphatation biologique pourrait s'effectuer pour une concentration nulle de magnésium à l'affluent, ce qui est contraire aux observations expérimentales, suggérant que les ions magnésium sont absolument nécessaires au co-transport du phosphore (Comeau *et al.*(1987); Rickard et McClintock(1992)). Cette erreur prédictive du modèle provient de la façon dont le taux de réaction du magnésium est modélisé – proportionnellement au taux de réaction du phosphore. Même si la concentration initiale de magnésium dans la liqueur mixte est nulle, du magnésium est généré à partir des réactions résultant en un relargage de phosphore. Ainsi, à de faibles concentrations de magnésium, inclure une fonction de saturation portant sur la réaction de synthèse aérobie des poly-P ne semble pas suffisant.

3.3.1.2 Concentrations affluentes d'acétate

Une augmentation de la concentration d'acétate affluente résulte en des réserves de PHA accrues, et en une augmentation notable de la concentration de biomasse déphosphatante. À partir de la concentration d'acétate affluente seuil de 500 mg DCO/L, la biomasse déphosphatante prédomine. À une concentration affluente d'acétate de 1500 mg DCO/L, la concentration de phosphore résiduelle est inférieure à 1 mg P/L.

3.3.2 Analyses de sensibilité effectuées sur des paramètres opérationnels

3.3.2.1 Cyclologies d'opération du RBS

D'autres cyclologies que celle utilisée expérimentalement résultent en une efficacité d'enlèvement du phosphore similaire, sinon supérieure. Des cyclologies de 6 et de 8 heures composées aussi de 5 phases (cycles 2 et 3) résultent en une concentration résiduelle de phosphore quasi similaire à la concentration résiduelle obtenue avec la cyclologie d'opération expérimentale. De plus, les deuxièmes phases non aérée (NA-2) et aérée (O₂-2) ne seraient pas absolument nécessaires. En effet, une cyclologie de 12 heures composée seulement d'une phase non aérée et d'une phase aérée (cycle 6) résulte en une concentration de phosphore résiduelle de seulement 2,4 mg P/L et la concentration résiduelle de phosphore la plus basse (1,8 mg P/L) est obtenue avec une cyclologie de 8 heures, composée aussi seulement d'une phase non aérée et d'une phase aérée (cycle 5). L'azote ammoniacal s'accumulerait pour les cyclologies d'une durée de 6 heures simulées (cyclologies 1,2 et 4) mais serait totalement consommé pour les autres cyclologies.

3.3.2.2 Temps de rétention hydraulique

Les analyses de sensibilité menées sur le temps de rétention hydraulique montrent qu'il existe un TRH optimal pour la déphosphatation biologique. Si le TRH est trop faible (ex: 28h, 32 h), cela ne laisse pas assez de temps à la biomasse déphosphatante de synthétiser ses composés de stockage à partir de l'acétate. Par conséquent, la biomasse déphosphatante tombe à des concentrations très faibles, et la biomasse hétérotrophe prédomine nettement. En revanche, si le TRH est trop élevé (ex: 75h, 112 h, 223 h) la quantité en acétate fournie par l'alimentation n'est pas suffisante pour assurer une capacité de déphosphatation biologique optimale. Parmi les TRH simulés, un TRH de 56 heures assure la concentration résiduelle de phosphore la plus faible. L'azote ammoniacal serait presque totalement consommé pour tous les TRH simulés.

3.3.2.3 Temps de rétention des boues

Comme pour le TRH, les analyses de sensibilité menées sur le TRB montrent qu'il existe un TRB optimal pour la déphosphatation biologique. À de faibles TRB (ex: 4,7 et 6,2 jours), l'efficacité de la déphosphatation biologique semble sérieusement compromise. En effet, de si faibles TRB ne laissent pas assez de temps à la biomasse déphosphatante de constituer ses composés de stockage. D'après ces simulations, le TRB doit atteindre au moins 9 jours pour que la biomasse déphosphatante prédomine. Des TRB plus élevés que le TRB expérimental de 21 jours (ex: 31 jours, 46,5 jours) ne semblent pas améliorer l'efficacité d'enlèvement du phosphore. Parmi les TRB simulés, le TRB optimal, sur la base de la concentration résiduelle de phosphore, est de 13 jours. La consommation de l'azote ammoniacal serait totale pour tous les TRB simulés. Néanmoins, une diminution du TRB ralentirait le taux de consommation de l'azote ammoniacal. Les résultats pour les nitrates sont difficilement interprétables.

3.3.2.4 Conclusion

Les résultats des analyses de sensibilité présentés doivent être interprétés de manière semi quantitative, comme des tendances relatives. Comme les résultats relatifs aux nitrates sont difficilement interprétables, le terme "optimal" n'a été défini que sur la base de la concentration résiduelle de phosphore à l'effluent. Malgré le caractère partiel de ces analyses de sensibilité, celles-ci pourraient néanmoins servir de base afin de guider des études de "design expérimental" visant à optimiser l'enlèvement du phosphore.

3.4 Principaux aspects à améliorer (résumé du chapitre VI)

La modélisation du magnésium devrait être améliorée. La modélisation actuelle ne permet pas de clore son bilan de masse et ne considère donc pas correctement l'effet inhibiteur d'une concentration nulle de magnésium à l'affluent sur la bio-P. En effet, comme le magnésium a été modélisé en proportion directe avec le phosphore, et que la fonction de saturation du magnésium ne porte que sur la réaction de synthèse aérobie/anoxie des poly-P, les autres réactions impliquant un relargage de phosphore génèrent du magnésium. Une solution proposée serait d'inclure la fonction de saturation du magnésium dans toutes les réactions impliquant le phosphore. Les résultats obtenus suite à ces modifications montrent que cette solution permet en effet de prévenir tout enlèvement du phosphore à une concentration affluente de magnésium nulle. Cependant, la concentration en PHA résultante est considérablement plus élevée.

La cause de la divergence des profils d'azote ammoniacal et de nitrates obtenus sur Matlab et sur GPS-X devrait être identifiée. Dans les deux cas, l'ammonification se poursuit durant la deuxième phase non aérée, résultant en une quantité d'azote ammoniacal disponible pour une nitrification durant la dernière phase aérée, alors

qu'expérimentalement, la concentration de nitrates demeure nulle suite à la première phase non aérée. La cinétique de nitrification est nettement plus élevée sur GPS-X. Le comportement simulé des nitrates face à un changement des conditions opérationnelles, notamment face à un changement du TRB, est difficilement interprétable. Ainsi, il serait recommandé d'améliorer la calibration du modèle vis-à-vis de l'azote ammoniacal et des nitrates.

CHAPITRE IV

MODELLING OF THE BIOLOGICAL PHOSPHORUS REMOVAL FROM A CHEESE FACTORY EFFLUENT BY AN SBR

Dans ce chapitre, seront présentés les conditions d'opération du RBS-pilote, les caractéristiques de l'affluent pour le jour correspondant au suivi intensif choisi, le modèle utilisé, les ajouts effectués au modèle afin de tenir compte des conditions particulières prévalant sur l'effluent d'Agropur, la calibration réalisée et les résultats finaux de modélisation.

L'article présenté dans ce chapitre a été soumis à la revue Water Science and Technology, pour la post-conférence de l'IAWQ à Narbonne (10-12 juillet 2000) portant sur les réacteurs biologiques séquentiels.

MANUSCRIT

MODELLING OF THE BIOLOGICAL PHOSPHORUS REMOVAL FROM A CHEESE FACTORY EFFLUENT BY AN SBR

R. Caroline Ky*, Yves Comeau†, Michel Perrier** and Imre Takacs*****

*Department of Civil, Geological and Mining Engineering, Ecole Polytechnique,
P.O. Box 6079, Station centre-ville, Montreal (Quebec) Canada H3C 3A7

**Department of Chemical Engineering, Ecole Polytechnique

***Hydromantis, 1685 Main Street West, Suite 302, Hamilton (Ontario) Canada
L8S 1G5

†Corresponding author

4.1 Abstract

A mathematical model, named A3TX, based on ASM3(A3) for C and N removal, on the bio-P model of the Technological University of Delft (T), and on extra processes (X) for chemical and biological phosphorus removal, was developed and used to simulate the treatment of a fermented cheese factory effluent by a sequencing batch reactor (SBR). Experimental data obtained from a pilot-scale SBR were used to calibrate the model. The model calibration was performed by changing a minimal number (four) of default values for parameters, and by introducing a Monod function to account for magnesium limitation. This study suggests that the value of stoichiometric and kinetic model parameters determined with municipal effluents or enriched bio-P cultures can be reasonably used with some agro-industrial effluents with minimal parameter adjustment for calibration.

4.2 Keywords

Mathematical modelling, biological phosphorus removal, industrial wastewater treatment, sequencing batch reactor, magnesium.

4.3 Introduction

In a bio-P process, phosphorus is stored intracellularly by polyphosphate (poly-P) accumulating organisms (PAOs) when the biomass is subjected to alternating anaerobic and aerobic conditions. Poly-P and glycogen provide energy under anaerobic conditions to allow for poly- β -hydroxyalkanoates (PHA) storage which, in turns, provides energy and carbon for growth, poly-P storage and glycogen synthesis (Smolders *et al.*, 1994a).

A number of well known models are used to describe the biological treatment of wastewater. Carbon (C) and nitrogen (N) removal are described, in particular, by ASM1 (Henze *et al.*, 1987) and ASM3 (Gujer *et al.*, 1999). Bio-P removal is described by the General model (Barker and Dold, 1997) and the closely related ASM2 (Gujer *et al.*, 1995) model, and by the Technological University of Delft (TUD) model (Smolders *et al.*, 1994a, b; Murnleitner *et al.*, 1997). Both of these groups used enriched bio-P cultures fed with acetate as sole carbon source to characterise the behaviour of bio-P bacteria (Wentzel *et al.*, 1989a, b; Smolders *et al.*, 1994a, b). The General and ASM2 models were developed as parametric models whereas the TUD model was developed as a metabolic one. These models also differ in their way of dealing with the maintenance energy required by the biomass. The concept of death-regeneration is used in the ASM1, ASM2 and the General models whereas the concept of endogenous respiration is used in the ASM3 and TUD models. Chemical phosphorus precipitation with metallic cations is described in the ASM2 model.

The purpose of this study was to develop a comprehensive model that would consider all the major processes that took place in an SBR treating a fermented industrial effluent, and to test how many changes would be needed to properly describe the observed phenomena.

The Agropur plant, located at Notre-Dame-du-Bon-Conseil (Quebec), mainly produces cheese and cheese whey powder as a by-product. The production equipment is cleaned

with caustic soda, nitric acid and phosphoric acid. As a result, the concentration of phosphorus discharged to the receiving water is excessive. Source reduction and effluent treatment were considered to reach a 1 mg P/L effluent objective. Enhanced biological phosphorus (bio-P) removal by a sequencing batch reactor (SBR) process was evaluated at lab-scale and pilot-scale for its potential to reach this effluent objective over a period of two years.

A large data set was collected with the two bio-P SBRs treating the P-rich fermented cheese factory effluent. Regular as well as intensive cycle samplings were conducted which could be used for model calibration. The question raised, however, was how well can the values of the model parameters developed for C, N and bio-P removal from municipal wastewater (and enriched bio-P cultures) treatment, be transposed to industrial wastewater treatment ? This difficulty was compounded by the unstable influent wastewater quality and by the continuously varying conditions in an SBR process.

4.4 Methodology

4.4.1 Models

The A3TX model was developed on the basis of the activated sludge model no. 3 (ASM3; Gujer *et al.*, 1999) for carbon and nitrogen removal (A3), the bio-P model of the Technological University of Delft (TUD; Murnleitner *et al.*, 1997; Brdjanovic, 1998; T) and extra processes for chemical and biological phosphorus removal (X).

ASM3 instead of ASM1 (Henze *et al.*, 1987) was used mainly because maintenance energy is represented by the concept of endogenous decay instead of the more complex death-regeneration mechanism. As pointed out by van Loosdrecht *et al.* (1999), this latter mechanism may be useful to fit oxygen consumption data but may not necessarily be true from a microbiological point of view. The concept of endogenous respiration is also that used for the TUD bio-P model.

The bio-P removal processes were taken from the TUD metabolic model that was directly derived from the proposed metabolism of PAOs (phosphorus accumulating organisms) and verified experimentally in enriched cultures fed with acetate as sole carbon source (Smolders *et al.*, 1994a). These last authors also quantified the effect of the extracellular pH on the ratio of phosphorus released to VFA stored.

Phosphorus precipitation takes place with iron and aluminum salts (ASM2 Gujer *et al.*, 1995) or with calcium salts (Maurer *et al.*, 1999). Biologically induced calcium phosphate precipitation may occur in bio-P removal processes because of the high phosphate concentration, if the calcium and pH levels are also high enough. Precipitation with calcium to form hydroxyapatite via the resolubilisable hydroxydicalcium phosphate intermediate, was modelled using the model proposed by Maurer *et al.* (1999).

A magnesium Monod-type saturation function was added to the aerobic and anoxic phosphate uptake processes to consider the limitation observed with this compound in the pilot-scale SBR.

A list of all the state variables and processes used in the A3TX model is presented in Table 4.1 and a schematic drawing of all its processes is shown in Figure 4.1.

4.4.2 Modelling software

The code for the comprehensive model was written in Matlab 5.3. (The MathWorks, Natick, MA). The equations were solved using the function “ode23s” for stiff ordinary differential equations systems.

The same model structure was entered into the GPS-X 2.4.1 modelling software (Hydromantis, Hamilton, Ontario). A new tool called “Model Developer” was developed

to describe the complete model into a Microsoft Excel spreadsheet and to generate the GPS-X code with an Excel Visual Basic macro.

4.4.3 Pilot-scale SBR

Dynamic cycle data were obtained on day 120 during a period of relatively stable operation. This “stable” conditions was evaluated on the basis of the mixed liquor volatile suspended solids concentration, phosphorus, nitrogen and COD removal. The effluent treated by the SBR was pre-fermented in an equalisation tank. The influent characteristics are presented in Table 4.2, the operational conditions are summarised in Table 4.3, and the operating cycle is shown in Table 4.4. A paper presenting a more complete description of the performance of a lab-scale SBR treating the same phosphorus-rich industrial effluent was presented by Comeau *et al.* (1996).

4.4.4 Calibration

All computer simulations for the SBR were performed until a pseudo steady-state was reached, requiring a period of at least three sludge ages.

The model was calibrated using dynamic cycle data from the pilot-scale SBR. First, the model was tested with the default values proposed in the ASM3, TUD, ASM2, and Maurer *et al.* models which are presented in the corresponding papers. Then, a minimal number of sensitive parameters for the case studied were adjusted for model calibration.

4.5 Results and discussion

Simulations were first performed using only the default values proposed for the stoichiometric and kinetic parameters at 20°C. The results obtained from key parameters are summarised in Figures 4.2 and 4.3, and in Table 4.6. The PHA production was reasonably well predicted, but the production of poly-P was overestimated.

The phosphorus profile from the SBR is presented in Figure 4.2. The predicted anaerobic phosphorus magnitude release was considerably higher than measured. Under aerobic conditions, the uptake of phosphorus was very sharp, resulting in a total removal of phosphorus.

The experimental magnesium and phosphorus profiles for day 120 show a gradual decrease in the phosphorus uptake rate when the magnesium concentration approaches zero. Magnesium ions were shown to be co-transported with phosphate (Comeau *et al.*, 1987) and to be absolutely essential for the long term efficiency of bio-P removal processes (Rickard and McClintock, 1992).

Considering the low aluminum (data not shown), the low iron and the relatively high calcium concentration present in the influent, it was assumed that the precipitated P was essentially in the form of hydroxyapatite in the SBR. Using default parameters values, the simulated precipitated P concentration (185 mg P/L) exceeded the estimated precipitated phosphorus concentration (160 mg P/L).

Table 4.1 C, N and P state variables and processes of the « A3TX » model

State variables		Processes
Symbol	Description	
ASM3 (C and N removal)		
S_O	dissolved oxygen	Hydrolysis
S_S	readily biodegradable substrate	Aerobic storage of S_A to X_{STO}^I
S_{NH}	ammonium + ammonia nitrogen	Anoxic storage of S_A to X_{STO}^I
S_{NO}	nitrate plus nitrite nitrogen	Aerobic storage of S_F to X_{STO}^I
S_{ALK}	alkalinity of the wastewater	Anoxic storage of S_F to X_{STO}^I
S_I	inert soluble organic material	Aerobic growth on X_{STO}
X_I	inert particulate organic material	Anoxic growth on X_{STO}
X_S	slowly biodegradable substrate	Aerobic endogenous respiration of X_H
X_H	heterotrophic organisms	Aerobic respiration of X_{STO}
X_{STO}	cell internal storage product of Heterotrophic organisms	Anoxic respiration of X_{STO}
X_A	nitrifying organisms	Nitrification
		Aerobic endogenous respiration of X_A
TUD (Technological University of Delft; bio-P removal)		
S_{PO4}	soluble phosphorus	Storage of X_{PHA}
X_{PHA}	polyhydroxyalkanoates	Anaerobic maintenance
X_{PP}	polyphosphates	Aerobic lysis of X_{PHA}
X_{GLY}	glycogen	Aerobic storage of X_{PP}
X_{PAO}	phosphorus accumulating organisms	Aerobic glycogen formation
		Aerobic maintenance
		Anoxic lysis of X_{PHA}
		Anoxic storage of X_{PP}
		Anoxic glycogen formation
		Anoxic maintenance
ASM2 (metal-P removal)		
S_A^I	fermentation products	X_{MeP} formation
S_F^I	fermentable organic substrate	X_{MeP} redissolution
X_{MeOH}	metal hydroxyde	
X_{MeP}	metal phosphate	
Maurer <i>et al.</i> (Ca-P removal)		
HDP	hydroxydicalciumphosphate	HDP formation
HAP	hydroxyapatite	HDP redissolution
S_{Ca}	calcium	HAP formation
This study (magnesium limitation of bio-P uptake)		
S_{Mg}	soluble magnesium	

Note : S_S of ASM3 was divided into S_A and S_F

The calibrated profiles of PAO storage compounds is presented as continuous lines in Figure 4.3 and in Table 4.6. The PHA concentration at the end of the first anaerobic period corresponded to the experimental concentration. The consumption of PHA at the end of a cycle, however, was over-predicted as there was no PHA left at the end of a simulation cycle while experimentally, the remaining PHA concentration was 50 mg COD/L. The predicted poly-P concentration at the end of the cycle was similar to the experimental concentration. The precipitated P concentration at the end of a cycle, however, reached a value of 215 mg P/L, higher than measured (160 mg P/L), and higher than before calibration. Glycogen measurements were not performed, and thus, the correspondence of the simulated results could not be verified. The predicted total suspended solids concentration at the end of a cycle was 8200 mg TSS/L, higher than the experimental concentration (7140 mg TSS/L). The simulated filtered COD decreased from 450 mg COD/L to 48 mg COD /L as experimentally observed.

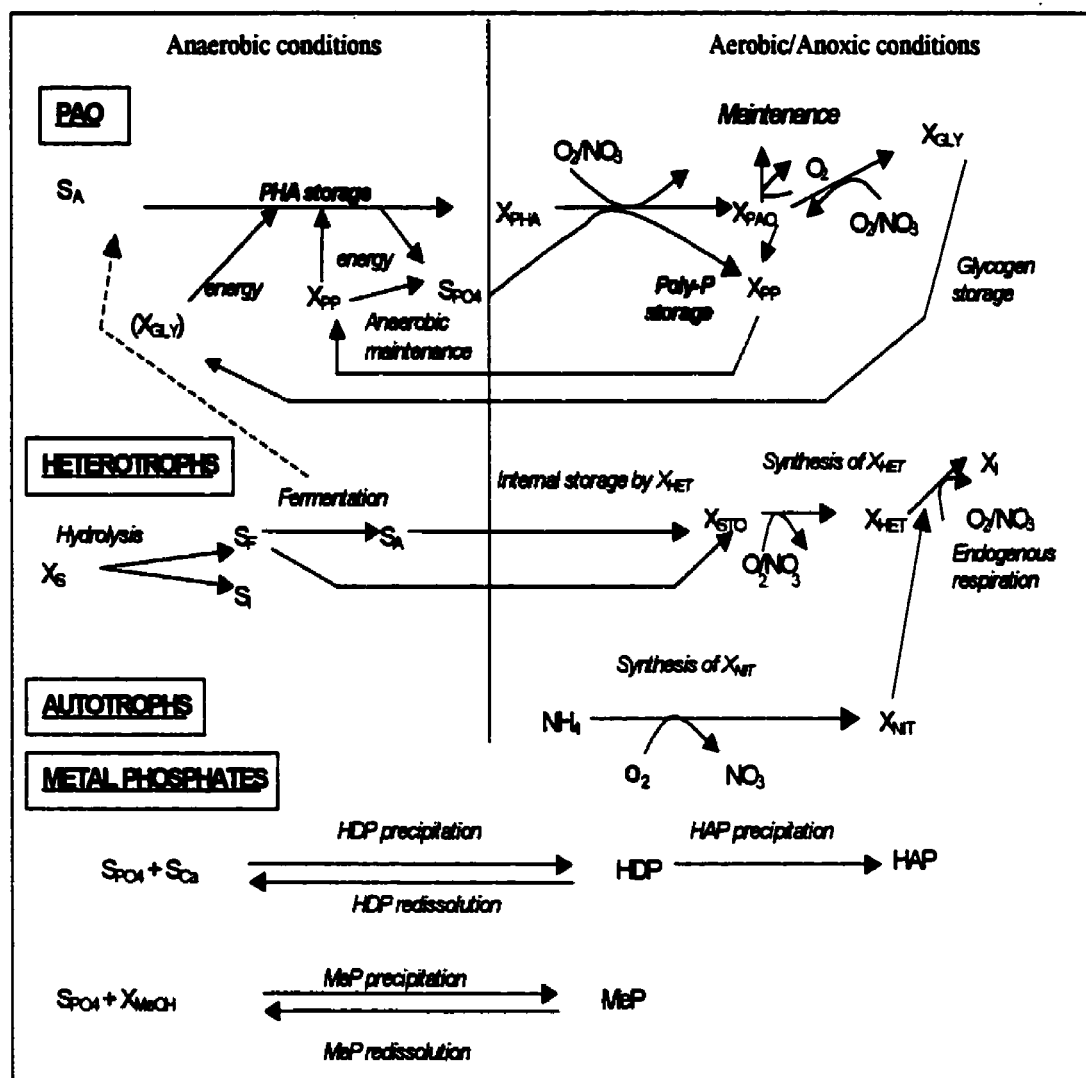


Figure 4.1 Processes of the "A3TX" model

Table 4.2 Influent SBR characteristics

Parameter	Unit	Value
Effluent source		Fermenter
Total COD	mg/L	2430
Filtrate COD	mg/L	1670
VFA	mg COD/L	1180
TSS	mg/L	890
VSS	mg/L	660
Pt	mg P/L	77
o-PO ₄	mg P/L	63
NTK	mg N/L	116
NH ₄	mg N/L	40
NO ₃	mg N/L	0
Ca	mg/L	61
K	mg/L	49
Mg	mg/L	7.8
Fe	mg/L	0.5

Table 4.3 Operational conditions for the SBR

Parameters	Units	Value
Volume	L	1860
Effluent volume	L	465
Purge	L	45
HRT	d	2
SRT	d	21.4
Temp. of mixed liquor	°C	27
pH End of AN-1	-	6.8
pH End of O ₂ .1	-	7.7

Note: HRT: Hydraulic retention time;
SRT: sludge retention time.

Table 4.4 SBR operating cycles

Phase	Mixing	Duration (h)
NA-1	On	3
O ₂ -1	On	4
NA-2	On	1.5
O ₂ -2	On	2.5
S/D/I	Off	1
Total cycle duration		12

Note: NA: non-aerated; O₂ : aerated; S/D/I: settle/decant/idle. Influent feeding took place during the first 20 minutes of phase NA-1 and activated sludge was wasted at the end of phase O₂-2.

The effect of a limitation in magnesium was taken into account by multiplying the aerobic and anoxic poly-P synthesis rates by a Monod-type of saturation function $MS_{Mg} = S_{Mg}/(S_{Mg} + K_{Mg})$, where S_{Mg} represents the soluble magnesium concentration and K_{Mg} the half saturation constant. The value of K_{Mg} was estimated experimentally at 10 mg Mg/L. The stoichiometric relationship between magnesium and phosphate was also determined experimentally as 0.157 g Mg/g P.

The magnitude of the anaerobic phosphorus release was calibrated by adjusting the ratio of phosphorus released over acetate consumed (Y_{PO4}) from its expected value of 0.44 g P/g acetate as COD (estimated from the solution pH) to the experimental value of 0.35 g P/g COD (determined on day 120). This adjustment, however, did not sufficiently decrease the simulated phosphorus release. The Y_{PO4} value was further reduced to 0.22, an adjustment that seems difficult to justify on a theoretical basis. The discrepancy between the theoretical and experimental Y_{PO4} values may be explained by the presence of glycogen accumulating organisms (GAO), a group of bacteria that is able to store volatile fatty acids anaerobically without using poly-P reserves (Sato *et al.*, 1992; Cech and Hartman, 1993; Liu *et al.*, 1997), reducing the expected value of Y_{PO4} . The presence of propionate and butyrate in addition to that of acetate in the influent (about 20%, 20% and 60% of the influent COD, respectively), may also affect the Y_{PO4} ratio since the expected relationship determined by Smolders *et al.* (1994a) with acetate may not be identical for propionate and butyrate. For equivalent amounts of COD taken up, the

uptake of propionate and butyrate was shown to result in a lower release of phosphorus (Abu-Ghararah and Randall, 1991) than for the uptake of acetate.

Further adjustments (summarised in Table 4.5) were made to improve the calibration. The aerobic poly-P synthesis rate (k_{pp}) was reduced from 0.11 to 0.07 g P g⁻¹ X_{PAO} -COD d⁻¹ to better match the observed phosphorus uptake rate and to reduce the maximum amount of poly-P formed. The aerobic and anoxic yield coefficients (Y_{PHAO} and Y_{PHANO}), which is the ratio of PHA consumed over bio-P biomass formed, were reduced by 20 % to stabilise the accumulation of the X_{PAO} biomass in the process. This reduction was deemed necessary since at too high X_{PAO} concentrations, the Monod saturation function for magnesium had little effect.

After these adjustments, the calibrated phosphorus profile (shown in Figure 4.2) fitted reasonably well with the experimental profile.

Although the mixed liquor temperature of the pilot-scale SBR was 27°C, no adjustments were made to the A3TX parameters default values established for 20°C. Little data is available about the Arrhenius constants for temperatures above 20°C for bio-P processes. Some of the deviation from the model predictions may be explained by a temperature effect. For example, as the temperature increases, the maintenance energy also increases (Brdjanovic, 1998) resulting in less biomass being produced. Temperature also affects the precipitation rates, as less precipitate is produced as the temperature increases (Maurer *et al.*, 1999).

The models developed with Matlab and with GPS-X gave essentially identical results.

Table 4.5 Parameters adjusted for model calibration

Parameter	Description	Units	Default value (20°C) (reference)	Adjusted value	Effect
<i>Stoichiometric parameters</i>					
Y_{PO4}	An. P released/ HAc taken up	g P/ g COD X_{PAO}	0.44 at pH = 6.8 (ref. 1)	0.22	Decreases the max. P conc. reached
Y_{PHAO}	Aer. X_{PHA} cons/ X_{PAO} synth.	g COD- X_{PHA} / g COD- X_{PAO}	1.44 (ref. 2)	1.80	Decreases the X_{PAO} conc.
Y_{PHANO}	Ax. X_{PHA} cons./ X_{PAO} synth.	g COD- X_{PHA} / g COD- X_{PAO}	1.76 (ref. 2)	2.2	Decreases the X_{PAO} conc.
<i>Kinetic parameter</i>					
k_{pp}	Aer or Ax. poly-P synthesis rate	g P/g COD- X_{PAO}	0.11 (ref. 3)	0.07	Decreases the aer. P uptake rate and the max. poly-P conc.

Notes: ref. 1: Smolders *et al.* (1994a); ref. 2: Murnleitner *et al.* (1997); ref. 3: Brdjanovic *et al.* (1998)
 An.: anaerobic; Aer.: aerobic; Ax.: anoxic; cons.: consumed; synth.: synthesised; max.: maximal;
 conc. concentration; HAc: acetate.

Table 4.6 Experimental and simulated concentrations for the SBR

Parameter (at the end of O ₂ -1)	Units	Experimental	SBR	
			Default	Calibrated
TSS	mg/L	7140	10000	8200
VSS	mg/L	4780	6430	5490
Precipitated P	mg P/L	160	185	215

4.6 Conclusion

A good calibration was obtained with the A3TX model developed to simulate the removal of carbon, nitrogen and phosphorus (biological and chemical) from a cheese-producing industrial effluent by an SBR. Only four model parameters needed to be adjusted from their default values determined with municipal effluents or enriched bio-P cultures. It was necessary, however, to add an extra Monod saturation function for magnesium to limit the aerobic or anoxic phosphorus uptake processes. Using dynamic data from an SBR cycle provided very useful data for model calibration. Further model

validation under various process conditions is recommended to further evaluate the potential of the model to be used to simulate bio-P removal from industrial wastewater effluents, notably by SBRs.

The A3TX model is based on a Peterson-type of matrix (Henze *et al.*, 1987) of 25 components by 27 processes. A new Microsoft Excel spreadsheet tool named "Model Developer" was developed and used to make the A3TX model available from GPS-X.

Using complex mechanistic models makes parameter identifiability challenging, but such models can be very useful to study and optimise existing or proposed wastewater treatment processes for C, N and P removal.

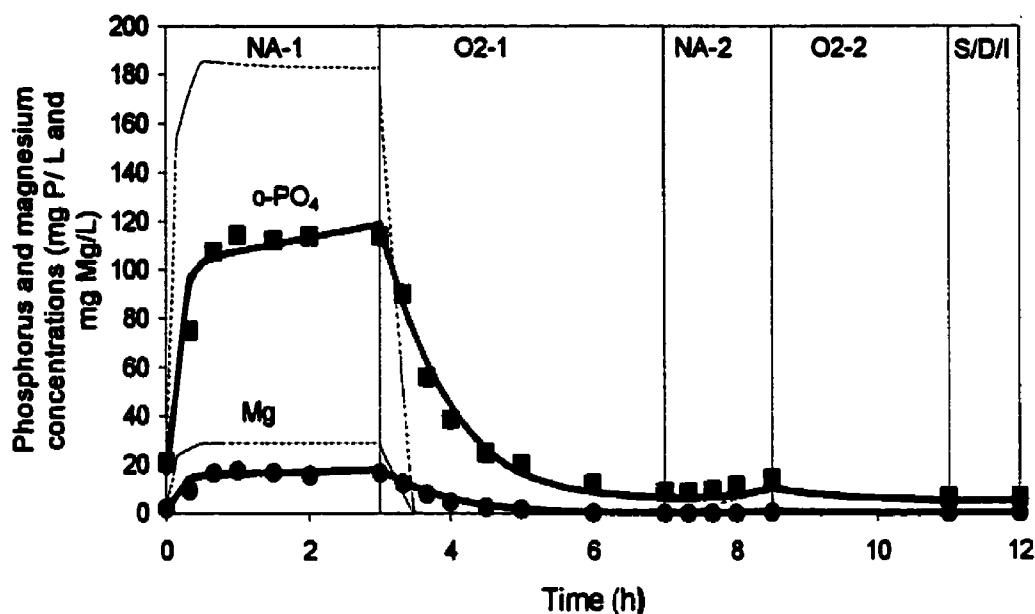


Figure 4.2 Comparison between experimental (data points) phosphorus and magnesium profiles and simulated profiles before (---) and after (—) calibration. See Table 4.4 for cycle phase definitions

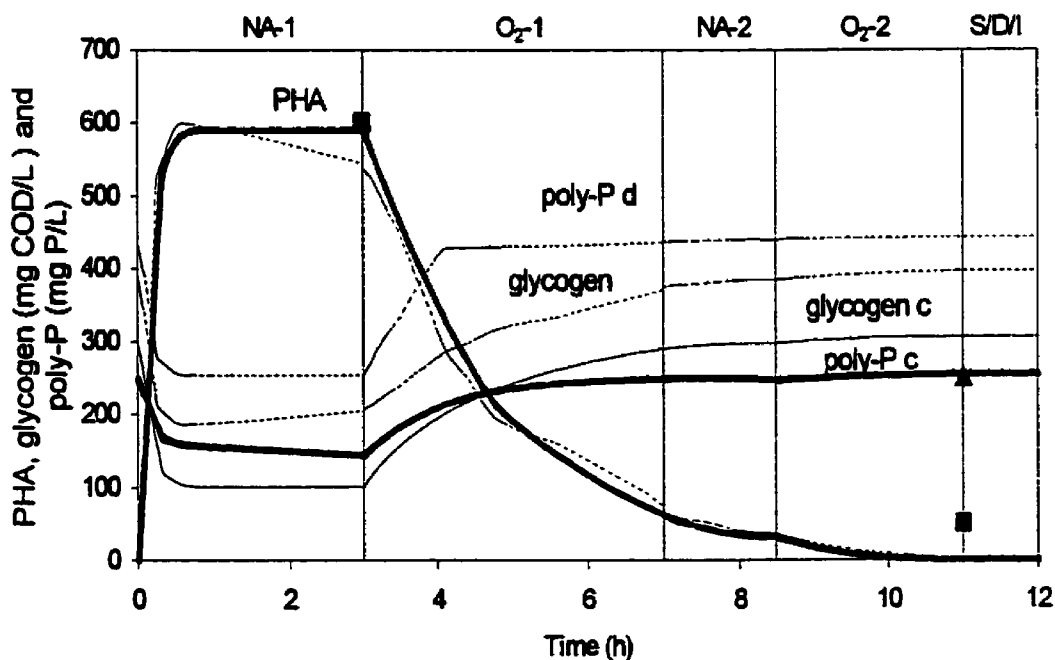


Figure 4.3 Simulated profiles of X_{PAO} storage compounds

Note: ■ : experimental PHA concentrations; ▲ : experimental poly-P concentrations;
 C: simulated with calibrated parameter values; d: simulated with default parameter values
 See Table 4.4. for cycle phases definitions

4.7 Acknowledgements

Financial support for this study was provided by the Natural Sciences and Engineering Research Council (NSERC). We thank Dr. Alain Larose for scientific and technical assistance and Bruce Tole of Hydromantis for writing the MS-Visual Basic code for "Model Developer" macro.

4.8 References

- ABU-GHARARAH Z.H. and RANDALL C.W. (1991). The effect of organic compounds on biological phosphorus removal. Wat. Sci. Tech., **23**(4), 585-594.
- BARKER P.S. and DOLD P.L. (1997). General model for biological nutrient removal in activated sludge systems. Wat. Environ. Res., **29**, 633-643.
- BRDJANOVIC D. (1998). Modeling Biological Phosphorus Removal in Activated Sludge Systems. Ph.D. thesis, Department of Biochemical Engineering, Technological University of Delft, The Netherlands.
- COMEAU Y., RABINOWITZ B., HALL K.J. and OLDHAM W.K. (1987). Phosphate release and uptake in enhanced biological phosphorus removal from wastewater. J. Wat. Pollut. Control Fed., **59**, 707-715.
- COMEAU Y., LAMARRE, D., ROBERGE F., PERRIER M., DESJARDINS G., HADE C. and MAYER R. (1996). Biological nutrient removal from a phosphorus-rich pre-fermented industrial wastewater. Wat. Sci. Tech., **34**(1-2), 169-177.
- CECH J.S. and HARTMAN P. (1993). Competition between polyphosphate and polysaccharides accumulating bacteria in enhanced biological phosphate removal systems. Wat. Res., **27** (7), 1219-1225.

GUJER W., HENZE M., MINO T., MATSUO T., WENTZEL M.C. and MARAIS G.V.R. (1995). Activated Sludge Model no. 2. IAWQ Scientific and Technical Report No.3, International Association for Water Quality, London, U.K.

GUJER W., HENZE M., MINO T. and VAN LOOSDRECHT M.C.M. (1999). Activated Sludge Model no. 3. Wat. Sci. Tech., 39(1), 183-193.

HENZE M., GRADY C.P.L. JR., GUJER W., MARAIS G.V.R. and MATSUO T. (1987). Activated sludge model no.1. IAWPRC Scientific and Technical Report No.1, International Association for Water Pollution Research and Control, London, U.K.

LIU W., NAKAMURA K., MATSUO T. and MINO T. (1997). Internal energy-based competition between polyphosphate- and glycogen-accumulating bacteria in biological phosphorus removal reactors- Effect of P/C feeding ratio. Wat. Res., 31(6), 1430-1438.

MAURER M., ABRAMOVICH D., SIEGRIST H. and GUJER W. (1999). Kinetics of biologically induced phosphorus precipitation in waste-water treatment. Wat. Res., 33(2), 484-493.

MURNLEITNER E., KUBA T., VAN LOOSDRECHT M.C.M. and HEIJNEN J.J. (1997). An integrated metabolic model for the aerobic and denitrifying biological phosphorus removal. Biotechnol. Bioeng., 54(5), 434-450.

RICKARD L.F. and MCCLINTOCK S.A. (1992). Potassium and magnesium requirements for enhanced biological phosphorus removal from wastewater. Wat. Sci. Tech., 26(9-11), 2203-2206.

SATOH, H., MINO T. and MATSUO T. (1992). Uptake of organic substrates and accumulation of polyhydroxyalkanoates linked with glycolysis of intracellular

carbohydrates under anaerobic conditions in the biological excess phosphate removal processes. Wat. Sci. Tech., 26(5-6), 933-942.

SMOLDERS, G. J. F., VAN DER MEIJ J., VAN LOOSDRECHT M.C.M. and HEIJNEN J.J. (1994a). Model of the anaerobic metabolism of the biological phosphorus removal process - Stoichiometry and pH influence. Biotechnol. Bioeng., 43, 461-470.

SMOLDERS, G. J. F., VAN DER MEIJ J., VAN LOOSDRECHT M.C.M. and HEIJNEN J.J. (1994b). Stoichiometric model of the aerobic metabolism of the biological phosphorus removal process. Biotechnol. Bioeng., 44, 837-848.

VAN LOOSDRECHT M.C.M. and HENZE M. (1999). Maintenance, endogenous respiration, lysis, decay and predation. Wat. Sci. Tech., 39(1), 107-117.

WENTZEL M.C., EKAMA G.A. and MARAIS G.V.R. (1989a). Enhanced polyphosphate organism cultures in activated sludge systems - Part II: Experimental behaviour. Water SA, 15, 71-88.

WENTZEL M.C., EKAMA G.A. and MARAIS G.V.R. (1989b). Enhanced polyphosphate organism cultures in activated sludge systems - Part III: Kinetic model. Water SA, 15, 89-102.

WILD D. and SIEGRIST H. (1999). The simulation of nutrient fluxes in wastewater treatment plants with EBPR. Wat. Res., 33(7), 1652-1662.

CHAPITRE V

MODÉLISATION DE L'ENLÈVEMENT DU PHOSPHORE D'UN EFFLUENT AGRO-ALIMENTAIRE: ANALYSES DE SENSIBILITÉ

5.1 Introduction

Une fois le modèle A3TX incorporé dans les bibliothèques du modèle GPS-X, l'impact du changement de certains paramètres fut étudié en réalisant des analyses de sensibilité ciblées. Celles-ci permettent de tester le comportement du modèle sur une gamme étendue de conditions et éventuellement de cibler les conditions optimales d'opération du procédé.

5.2 Méthodologie

Les analyses de sensibilité furent réalisées sur GPS-X pour des raisons de flexibilité et de rapidité. L'effet du changement d'une variable donnée fut étudié en simulant jusqu'à ce qu'un état pseudo-stationnaire soit atteint. Pour la plupart des simulations, les profils de phosphore, les concentrations des composés de stockage des PAO et la répartition des types de biomasses sont présentés. Les profils de l'azote ammoniacal et des nitrates obtenus pour les cyclogies d'opération du RBS, les TRH et les TRB simulés sont aussi présentés. Malgré les différences observées entre les résultats obtenus sur Matlab et GPS-X (cf. Section 3.2.5.2), aucun ajustement supplémentaire ne fut effectué sur GPS-X. Les "conditions témoin" réfèrent donc aux résultats simulés sur GPS-X avec les concentrations et conditions d'opération expérimentales (correspondant au suivi du jour 120) avec le modèle tel que calibré sur Matlab. Le tableau 5.1, les figures 5.1, 5.2 et 5.3 présentent les valeurs et profils obtenus par simulation (sur Matlab et GPS-X) de certaines variables « clés ».

Tableau 5.1 Résultats de calibration obtenus sur GPS-X

Paramètre	Unités	RBS-Pilote	
(fin de O ₂ -I)		Expérimental (jour 120)	Simulé
MES	mg/L	7140	7350
MVES	mg/L	4780	4920
P précipité	mg P/L	160	160

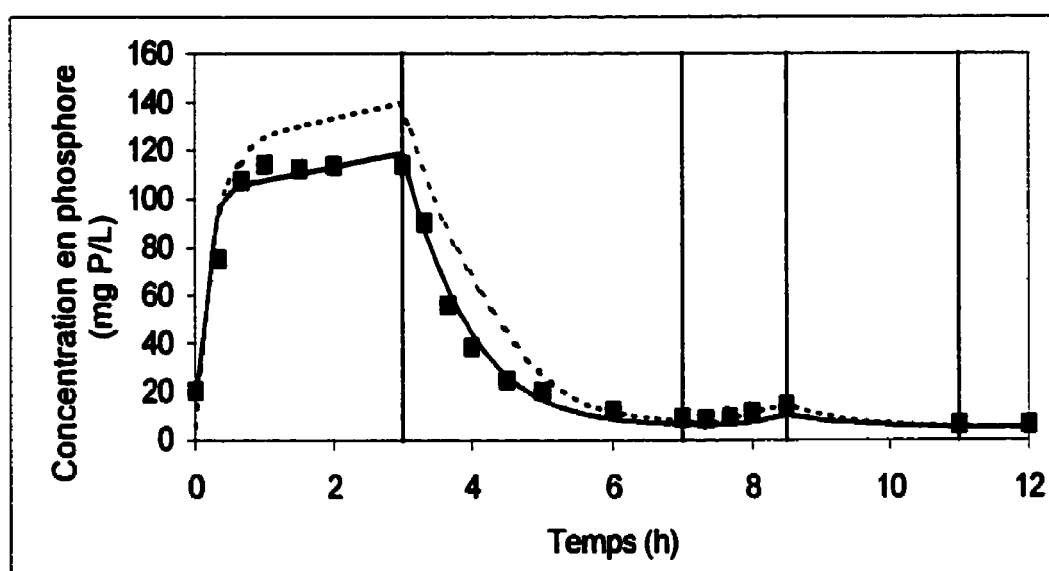


Figure 5.1 Comparaison entre les profils de phosphore simulés sur GPS-X (---), Matlab (—) et le profil expérimental (■) de la 120^{ème} journée d'opération du RBS-pilote

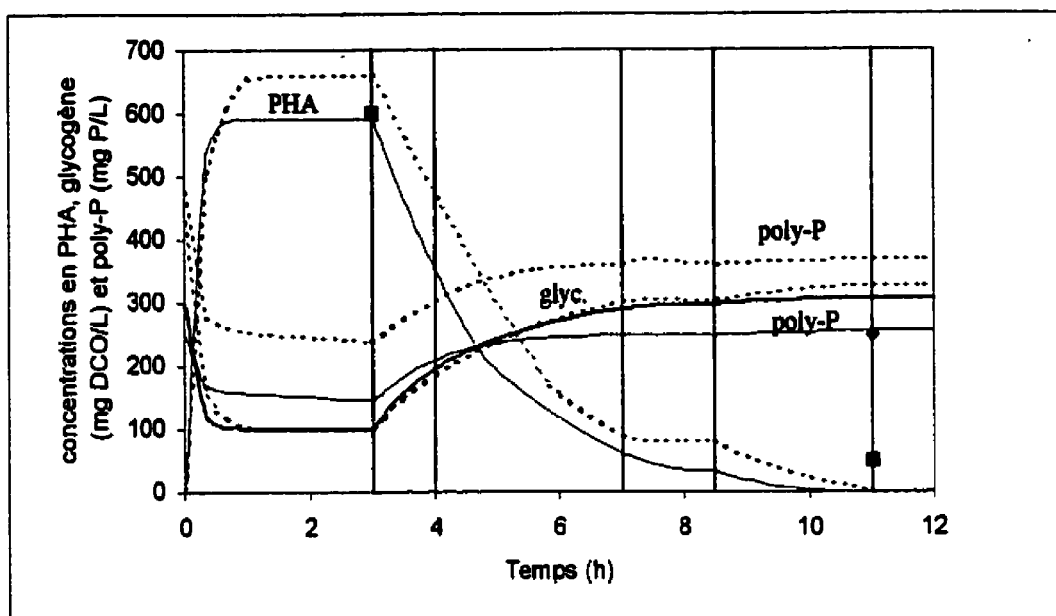


Figure 5.2 Profils simulés sur GPS-X (---) et sur Matlab (—) des composés de stockage des PAO (PHA, poly-P et glycogène) et données expérimentales pour le PHA (■) et pour les poly-P (◆) correspondant à la 120^{ème} journée d'opération du RBS-pilote
Note: glyc.: glycogène

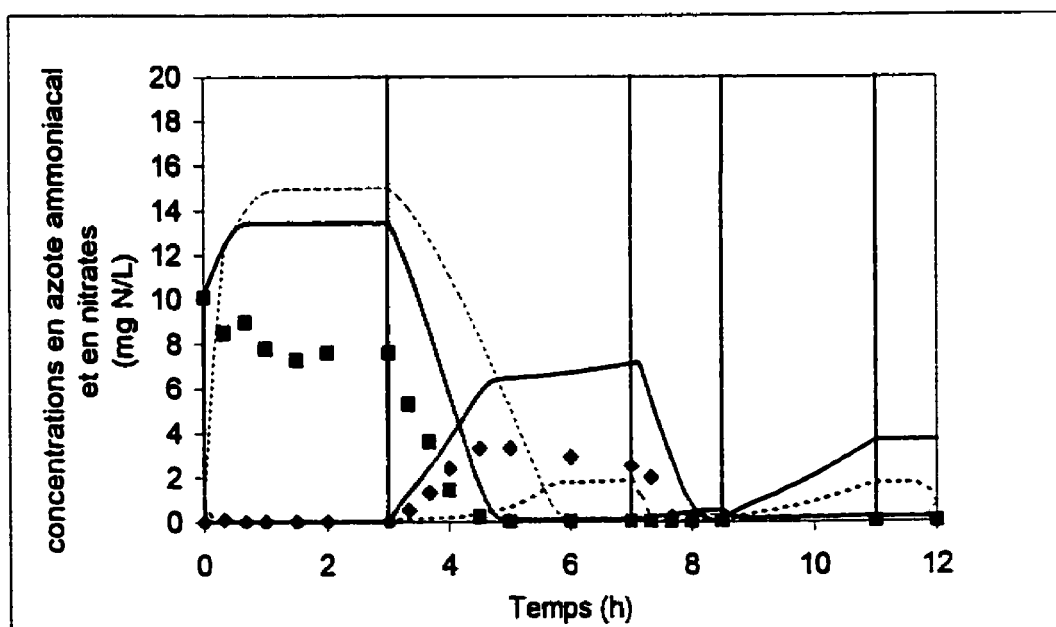


Figure 5.3 Profils simulés de l'azote ammoniacal et des nitrates sur GPS-X (---) et sur Matlab (—) et profils expérimentaux (■ : azote ammoniacal, ◆ : nitrates) correspondant au suivi intensif du 120^{ème} jour d'opération du RBS-Pilote.

5.3 Simulations prévues

5.3.1 Concentrations affluentes

Les concentrations affluentes retenues sont les concentrations de magnésium et d'acétate. En effet, dans cette étude, il est considéré que le facteur limitant pour le recaptage du phosphore est le magnésium. L'analyse de sensibilité vis-à-vis de la concentration de magnésium peut fournir des informations intéressantes, telle la concentration de magnésium requise afin d'obtenir un recaptage complet de phosphore. Une étude de sensibilité vis-à-vis de la concentration d'acétate pourrait indiquer quelle est la concentration d'acétate minimale requise pour que la déphosphatation biologique s'effectue. Les concentrations affluentes simulées pour le magnésium et l'acétate sont présentées dans les tableaux 5.2 et 5.3.

Tableau 5.2 Concentrations en magnésium simulées à l'alimentation

<u>Concentration en magnésium (mg/L)</u>
0
5
7,8 (<i>concentration expérimentale</i>)
10
15
20

Tableau 5.3 Concentrations en acétate simulées à l'alimentation

<u>Concentration en acétate (mg DCO/L)</u>
0
100
300
500
700
1000
1182 (<i>concentration expérimentale</i>)
1500

5.3.2 Conditions opérationnelles

Les paramètres opérationnels étudiés sont: la cyclologie d'opération du RBS, le temps de rétention des boues et le temps de rétention hydraulique. Ces analyses de sensibilité visent à déterminer si d'autres configurations seraient tout aussi ou plus efficaces au niveau de l'enlèvement du phosphore.

5.3.2.1 Cyclologie d'opération du RBS

Le tableau suivant présente les cyclologies simulées:

Tableau 5.4 Cyclologies d'opération du RBS simulées

	Temps (h)				S/D/I	Durée totale
	NA-1	O2-1	NA-2	O2-2		
Cyclologie expérimentale	3	4	1,5	2,5	1	12
Cyclologie 1	1,36	1,8	0,68	1,14	1	6
Cyclologie 2	1	2,16	0,68	1,14	1	6
Cyclologie 3	1,91	2,5	1	1,59	1	8
Cyclologie 4	3	2	---	---	1	6
Cyclologie 5	4	3	---	---	1	8
Cyclologie 6	2	5	---	---	1	8
Cyclologie 7	6	5	---	---	1	12

Les cyclologies de la première série (cyclologies 1, 2 et 3) sont composées d'une succession de 5 phases comme pour la cyclologie expérimentale mais sont de durées différentes.

Comme expérimentalement, il est observé que les phases NA-2 et O₂-2 contribuent à peine à un enlèvement supplémentaire de phosphore, elles ont été supprimées pour la deuxième série de cyclologies (Cyclologies 4 à 7).

5.3.2.2 Temps de rétention hydraulique

L'objectif de cette analyse de sensibilité visait à déterminer le temps de rétention hydraulique (TRH) optimal à l'enlèvement du phosphore.

Les analyses de sensibilité sur le TRH ont été effectuées en variant le débit d'alimentation du RBS et en supposant une excellente sédimentation des boues. Les simulations effectuées sont présentés dans le tableau 5.5

Tableau 5.5 Temps de rétention hydrauliques simulés

TRH (h)	Débit alimenté par cycle	
	(L/cycle)	(L/min)
223	100	5,05
112	200	10,1
75	300	15,2
56	400	20,2
48 (exp.)	465	20,3
37	600	30,3
32	700	35,4
28	800	40

Note: exp.: expérimental

5.3.2.3 Temps de rétention des boues

L'objectif de cette analyse de sensibilité visait à déterminer le temps de rétention des boues (TRB) optimal pour l'enlèvement du phosphore.

Les analyses de sensibilité sur le TRB ont été effectuées en variant le débit purgé à la fin du cycle. Les simulations réalisées sont présentées dans le tableau 5.6:

Tableau 5.6 Temps de rétention des boues simulés

TRB visé (jours)	Débit purgé	
	(L/cycle)	(L/min)
46,5	20	200
31	30	300
21(<i>exp.</i>)	45	450
16	60	600
13	70	700
11,5	80	800
10	90	900
9,5	100	1000
6	150	1500
4,7	200	2000

Note : exp. : expérimental

5.4 Résultats et discussion

5.4.1 Concentrations affluentes

5.4.1.1 Concentrations affluentes de magnésium

Les figure 5.4 et 5.5 présentent respectivement les profils de phosphore obtenus par simulation pour les différentes concentrations de magnésium et les concentrations des composés de stockage des PAO et du phosphore précipité.

Pour une concentration affluente de magnésium nulle, le profil de phosphore simulé est proche de celui observé expérimentalement; la concentration résiduelle de phosphore à l'effluent est plus élevée (9,5 mg P/L) que la concentration prédite pour les « conditions témoin ». La concentration maximale de PHA est quasi-similaire à celle obtenue pour les conditions témoin et la concentration de poly-P n'est que légèrement inférieure (305 mg P/L vs 370 mg P/L). Ceci peut paraître contradictoire, vu le rôle accordé au magnésium dans ce modèle. Cependant, le taux de variation du magnésium a été modélisé comme

étant directement proportionnel au taux de variation du phosphore. Ainsi, même sans magnésium à l'affluent, un relargage de magnésium se produit proportionnellement au relargage de phosphore. Le modèle présuppose donc que la déphosphatation biologique peut se produire même en l'absence de magnésium à l'affluent contrairement aux observations expérimentales suggérant que les ions magnésium seraient absolument nécessaires au co-transport du phosphore (Comeau *et al.* (1987); Rickard and McClintock, 1992). Ainsi, ces résultats mettent donc en évidence "une faille" au niveau de la modélisation du rôle du magnésium dans la bio-P. Quelques solutions sont proposées et discutées dans le chapitre VI.

Les résultats obtenus à une concentration de magnésium de 5 mg/L sont très proches de ceux des conditions témoin. La concentration de phosphore résiduelle est un peu plus élevée (6,7 mg/L au lieu de 5,3 mg/L). Les concentrations maximales des composés de stockage des PAO sont pratiquement inchangées.

À une concentration affluente de magnésium de 10 mg/L, la concentration résiduelle de phosphore n'est que de 1,2 mg/L. La concentration maximale en poly-P est aussi légèrement supérieure à celle des conditions témoin.

Le phosphore est totalement consommé quand la concentration de magnésium affluente est de 15 mg/L. Les concentrations maximales de PHA (690 mg DCO/L), de glycogène (350 mg P/L) et de poly-P (435 mg P/L) sont supérieures à celles atteintes pour les conditions témoin. À une concentration de magnésium affluente de 20 mg/L, le phosphore est également totalement consommé. Les concentrations maximales de PHA (720 mg DCO/L), de poly-P (440 mg P/L) et de glycogène (385 mg DCO/L) sont les plus élevées parmi les simulations réalisées, suggérant ainsi qu'en dessous de 20 mg/L, le magnésium limite les réactions de synthèse de ces composés.

La concentration de phosphore précipité sous forme d'hydroxyapatite est maximale (150 mg P/L) pour une concentration affluente de magnésium nulle et minimale (105 mg P/L)

pour une concentration affluente de magnésium de 20 mg/L; ceci suggère que quand le magnésium est limitant, une partie du phosphore non capté par les réactions biologiques est utilisé par les réactions de précipitation calcique.

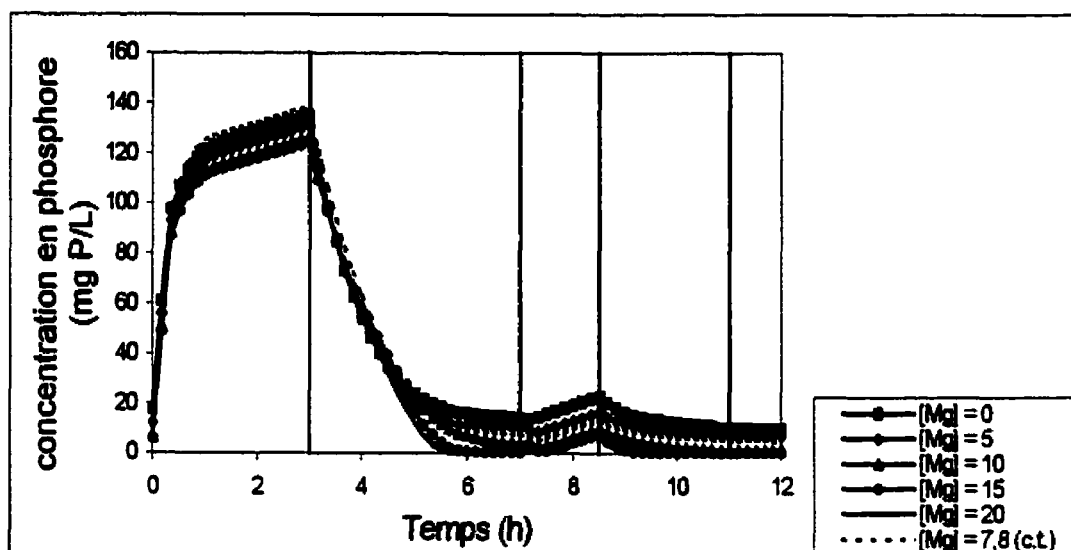


Figure 5.4 Profils de phosphore obtenus pour les concentrations de magnésium affluents simulés (mg/L)

Note : c.t. : conditions témoin

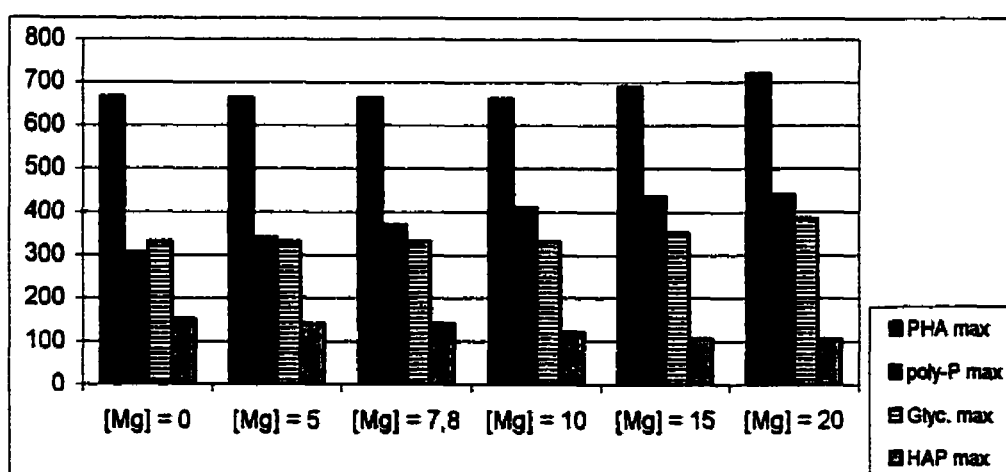


Figure 5.5 Concentrations maximales simulées des composés de stockage des PAO (poly-P, PHA et glycogène) et du phosphore précipité (hydroxyapatite), en mg P/L et en mg DCO/L, pour les concentrations affluents de magnésium simulés (mg/L)

5.4.1.2 Concentrations affluentes d'acétate

Les figures 5.6 et 5.7 présentent les profils de phosphore et les concentrations maximales atteintes des composés de stockage et du précipité de phosphore pour les différentes concentrations d'acétate simulées. La figure 5.8 présente la répartition des biomasses hétérotrophe et déphosphatante pour chaque concentration affluente d'acétate simulée.

À une concentration affluente d'acétate nulle, la concentration en PHA est quasiment nulle et l'enlèvement du phosphore ne se produit pratiquement pas. Une augmentation de la concentration d'acétate affluente résulte en une production de PHA accrue (cf. Figure 5.7), et par conséquent, en une production plus importante de la biomasse déphosphatante (cf. Figure 5.8). Le modèle prédit qu'il existe une concentration seuil d'acétate à l'affluent à partir de laquelle la biomasse déphosphatante prédomine; quand la concentration affluente d'acétate est inférieure à 500 mg DCO/L, la biomasse hétérotrophe prédomine. À des concentrations affluentes d'acétate supérieures, la biomasse déphosphatante devient la plus importante. À une concentration affluente d'acétate de 1500 mg DCO/L, la concentration de phosphore résiduelle est inférieure à 1 mg P/L.

La concentration en phosphore précipité sous forme d'hydroxyapatite est minimale (125 mg P/L) pour une concentration affluente d'acétate de 1500 mg DCO/L et maximale (155 mg P/L) pour une concentration affluente d'acétate nulle. Ceci suggère que quand l'acétate est limitant, une partie du phosphore non recapté par les réactions de déphosphatation biologique est consommé par les réactions de précipitation calcique.

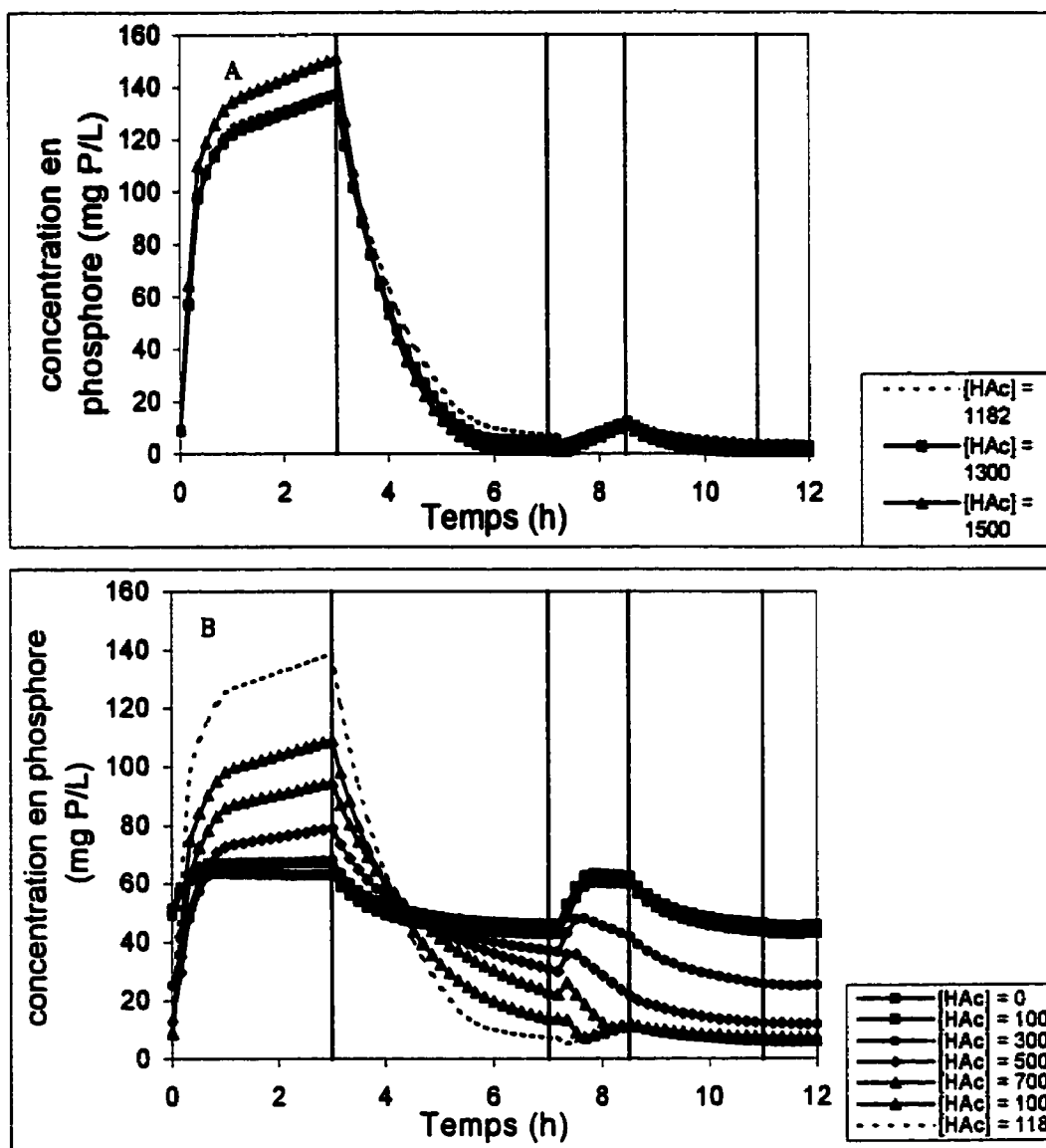


Figure 5.6 Profils de phosphore simulés pour les concentrations affluentes d'acétate simulées (A: $[HAc] < 1182$ mg DCO/L, B: $[HAc] > 1182$ mg DCO/L)

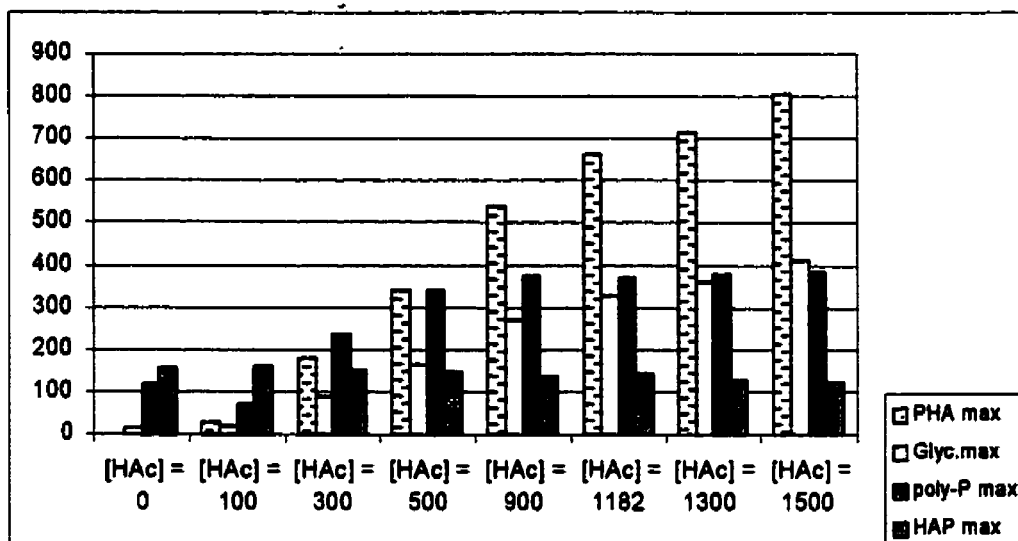


Figure 5.7 Concentrations maximales simulées des composés de stockage des PAO (PHA, glycogène, poly-P) en mg DCO/L et en mg P/L et du phosphore précipité (hydroxyapatite) pour les concentrations affluentes d'acétate simulées (mg DCO/L)

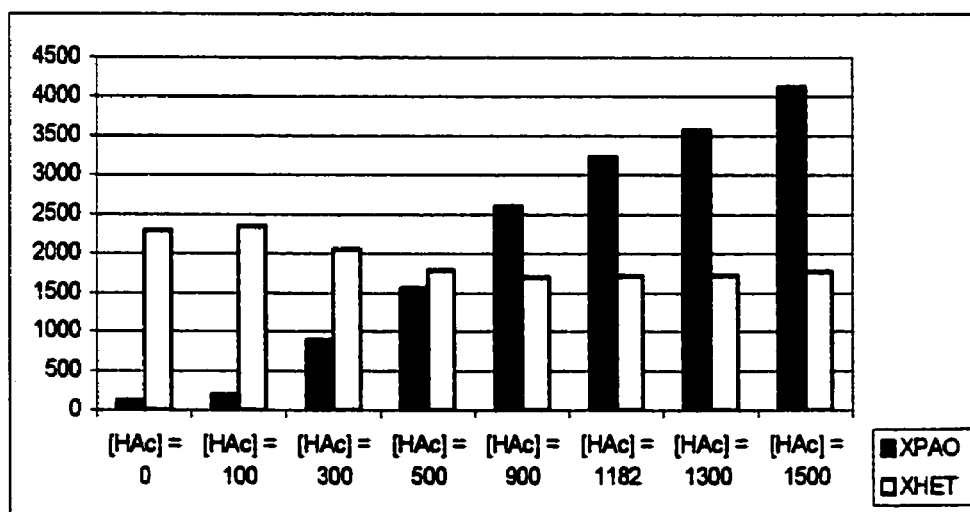


Figure 5.8 Répartition des biomasses hétérotrophe et déphosphatante en mg DCO/L pour les concentrations affluentes d'acétate simulées (mg DCO/L)

5.4.2 Conditions opérationnelles

5.4.2.1 Cyclologie du RBS

Les profils de phosphore obtenus pour les différentes cyclologies du RBS simulées, les concentrations maximales des composés de stockage des PAO (poly-P, PHA, glycogène), du phosphore précipité et les concentrations pseudo-stationnaires des biomasses hétérotrophe et déphosphatante sont présentés dans les figures 5.9 , 5.10 et 5.11.

Pour une cyclologie de 6 heures et une répartition des phases identiques à celle de la "cyclologie témoin", la concentration en PHA augmente considérablement (1600 mg DCO/L vs 660 mg DCO/L pour la cyclologie "témoin") alors que les concentrations des autres composés de stockage demeurent relativement inchangées. Les concentrations des biomasses déphosphatante et hétérotrophe sont aussi nettement plus importantes. Par contre, la concentration résiduelle de phosphore est bien plus élevée (15,3 mg P/L) ce qui suggère que la durée de la phase aérobie O_2-2 n'est pas assez longue. La suraccumulation de PHA peut s'expliquer par un taux de formation du PHA plus rapide que son taux de consommation.

Ces dernières suppositions sont confortées par les résultats simulés obtenus pour la cyclologie 2, où la durée de la phase aérobie O_2-1 est rallongée à 2,16 h (au lieu de 1,8 h pour la cyclologie 1), et où la durée de la phase anaérobie NA-1 est diminuée à 1 h (au lieu de 1,36 h pour la cyclologie 1). En effet, l'augmentation de la phase O_2-1 permet un recaptage plus important de phosphore résultant en une concentration résiduelle de phosphore nettement inférieure (4,9 mg P/L). La concentration de PHA est inférieure à celle atteinte pour la cyclologie 1 (1100 mg DCO/L au lieu de 1650 mg DCO/L pour la cyclologie 1). La concentration de biomasse déphosphatante est relativement inchangée.

Pour une cyclologie de 8 h, le fractionnement entre les périodes étant conservé (cycle 3), la concentration maximale en PHA (800 mg DCO/L) est supérieure à celle atteinte pour

la cyclologie témoin mais nettement inférieure à celle atteinte pour les cyclologies 1 et 2. La concentration en biomasse déphosphatante (4190 mg DCO/L) est supérieure à celle atteinte pour la cyclologie témoin mais inférieure aux concentrations atteintes pour les cyclologies 1 et 2. Les concentrations des autres composés de stockage demeurent relativement inchangées. La quantité de phosphore relargué en conditions anaérobies est légèrement inférieure à celle prédite pour la cyclologie témoin. La concentration résiduelle de phosphore est quasi-similaire (4,4 mg P/L vs 4,7 mg P/L).

Pour une cyclologie d'une durée de 6 h (cycle 4), seulement une période aérée de 3 h et une période non aérée de 2 h ne semblent pas suffisantes: la concentration résiduelle de phosphore est très élevée, à 15 mg P/L. La concentration de PHA est toutefois extrêmement élevée (1780 mg DCO/L). Comme pour les cyclologies 1 et 2, ceci peut éventuellement s'expliquer par un taux de formation du PHA plus rapide que son taux de consommation. Les cyclologies 5, 6 et 7 assurent un enlèvement de phosphore intéressant; les concentrations des composés de stockage sont à peu près similaires à celles obtenues pour la cyclologie témoin. Dans les trois cas, la concentration de la biomasse déphosphatante est supérieure (4200 mg DCO/L pour les cyclologies 5 et 7 et 3660 mg DCO/L pour le cycle 6) à la concentration "témoin" (3230 mg DCO/L). La concentration résiduelle de phosphore obtenue (5,3 mg P/L) pour la cyclologie 7 est supérieure à la concentration résiduelle de phosphore "témoin" (4,7 mg P/L). Par contre, les concentrations résiduelles de phosphore atteintes pour les cyclologies 5 et 6 n'atteignent respectivement que 1,8 mg P/L et 2,4 mg P/L.

Parmi les cyclologies simulées, sur la base de la concentration résiduelle de phosphore, les cyclologies 1, 3, 5 et 7 sont au moins tout aussi performantes que la cyclologie témoin. La meilleure performance est obtenue avec les cyclologies 5 et 7, d'une durée de 8 h et de 12 h sans deuxièmes périodes non aérée et aérée.

Cependant, ces conclusions ne tiennent pas compte de la nitrification. Les résultats obtenus pour les profils simulés d'azote ammoniacal et de nitrates, présentés dans les figures 5.12 et 5.13 suggèrent que tous les cycles excepté les cycles 1,2 et 4 permettent une consommation totale d'azote ammoniacal. Singulièrement, pour les cycles 1,2 et 4, l'azote ammoniacal simulé s'accumule, et la nitrification ne s'effectue pas. Les profils de nitrates simulés suggèrent que la production de nitrates durant la première phase aérobie est la plus élevée pour le cycle témoin. Cependant, les résultats obtenus pour les nitrates sont difficilement interprétables: en effet, le profil simulé des nitrates pour la cyclogie témoin ne correspond pas au profil expérimental. Par simulation, une nitrification presque aussi importante que celle prédite pour la première phase aérée s'effectue durant le deuxième phase aérée, alors qu'expérimentalement, la concentration en nitrates demeure nulle dès la fin de la deuxième phase non aérée. De plus, la concentration maximale de nitrates atteinte prédite par simulation est nettement inférieure à la concentration expérimentale.

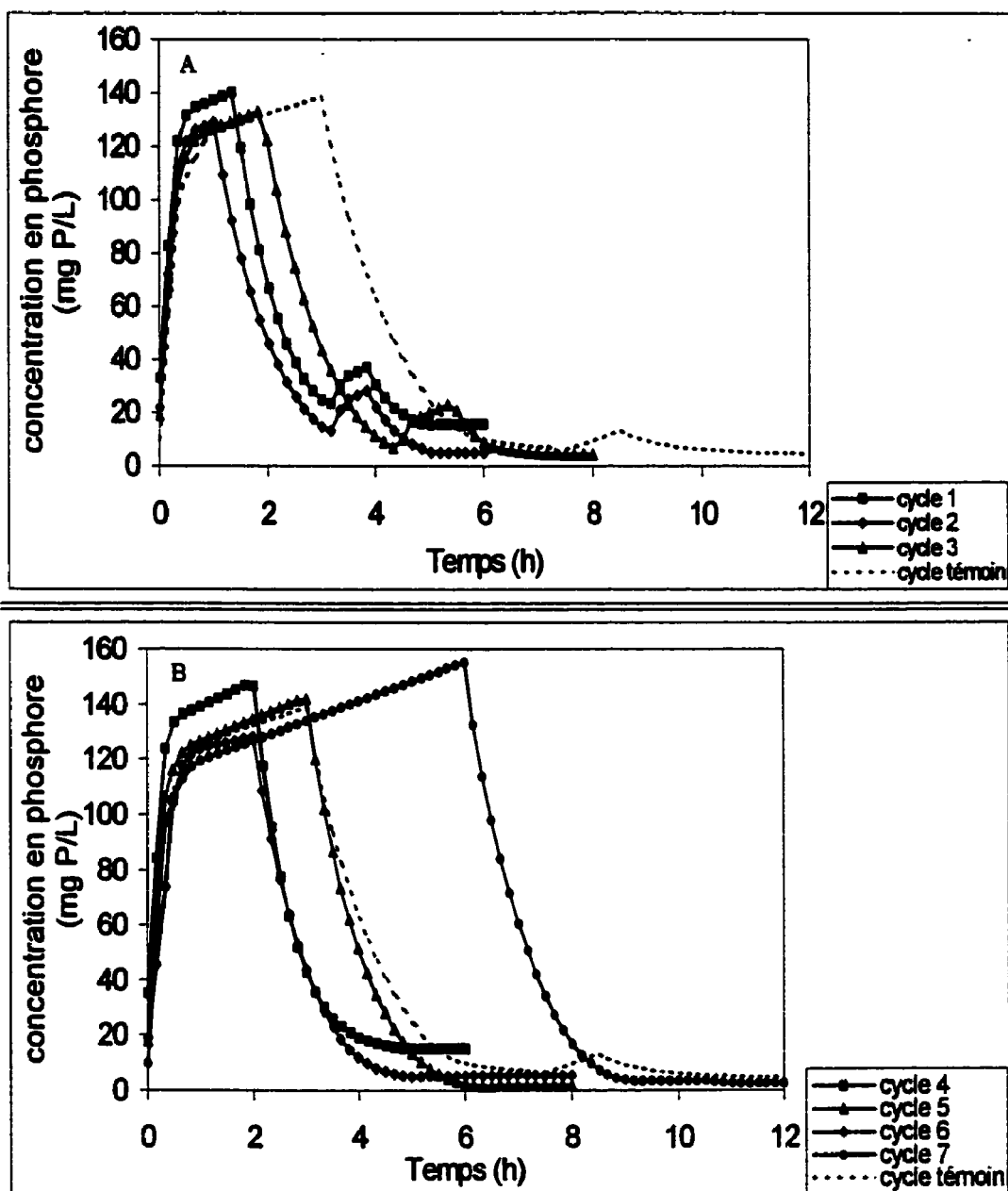


Figure 5.9 Profils de phosphore obtenus pour les cycles d'opération du RBS simulés (A: cycles 1, 2, 3 et témoin; B: cycle 4, 5, 6, 7 et témoin)

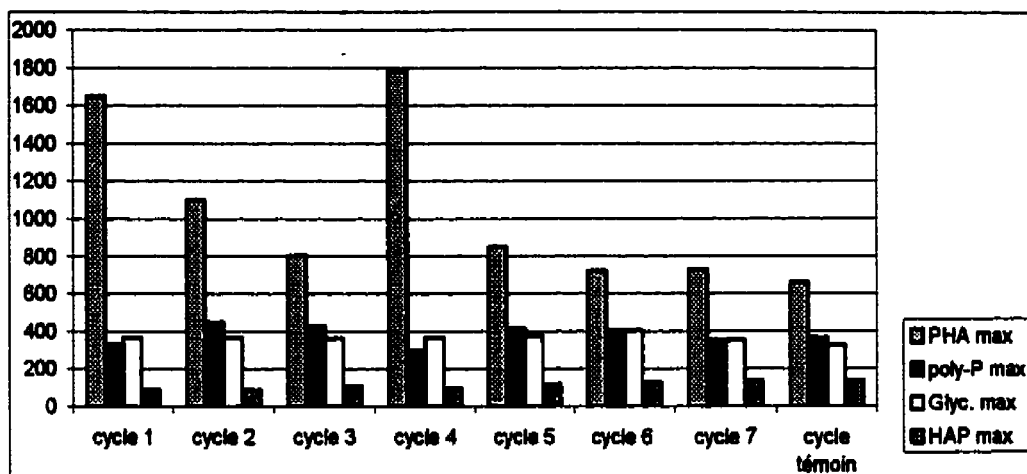


Figure 5.10 Concentrations maximales des composés de stockage des PAO (poly-P, glycogène, PHA) et du phosphore précipité (hydroxyapatite) en mg DCO/L et en mg P/L pour les cycles d'opération du RBS simulés

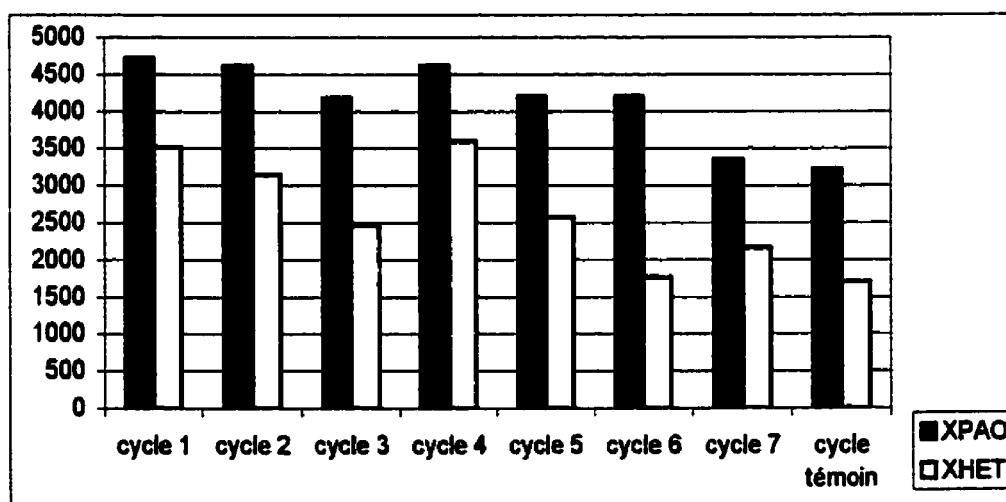


Figure 5.11 Répartition des biomasses hétérotrophe et déphosphatante (en mg DCO/L) pour les cycles d'opération du RBS simulés

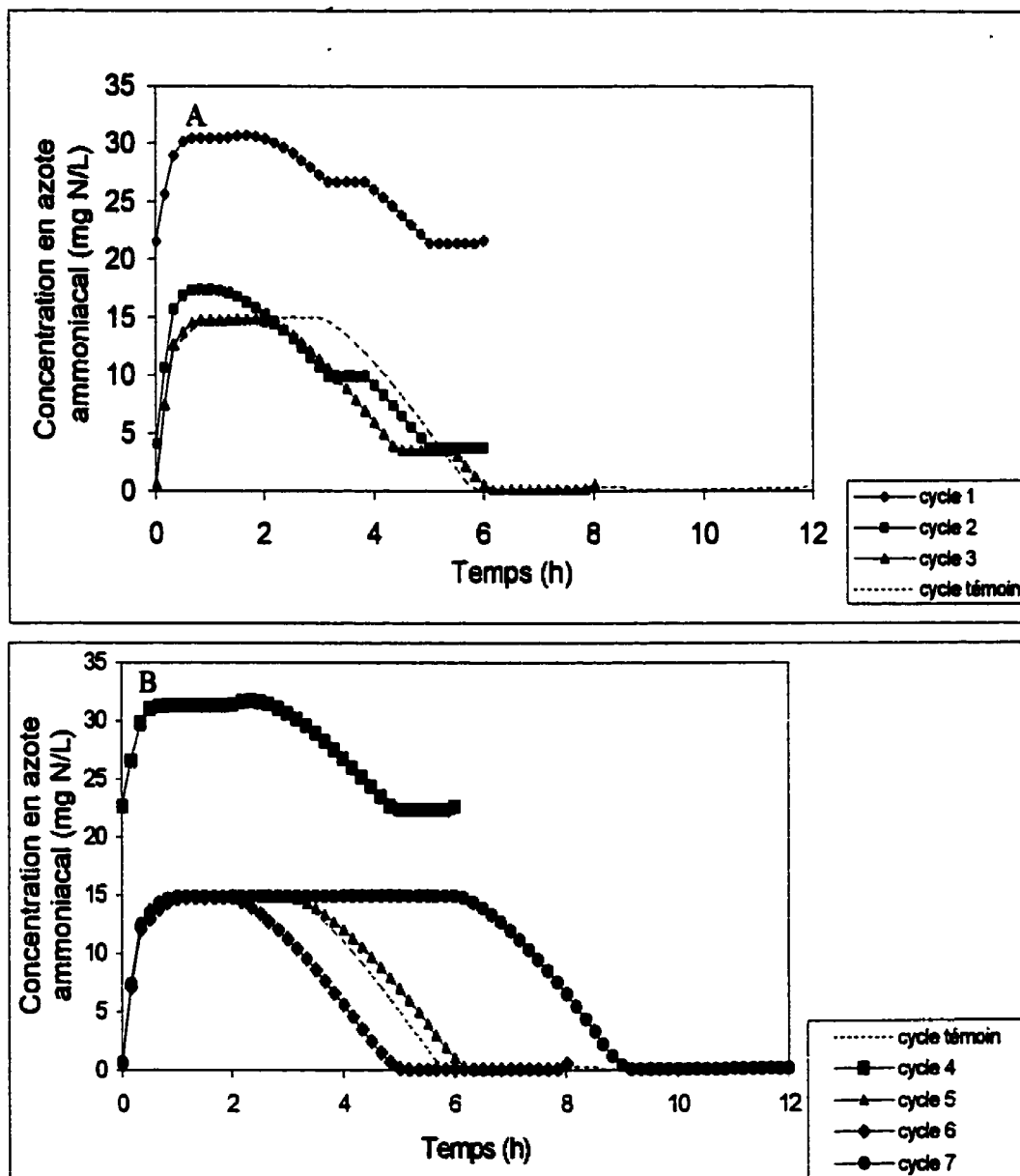


Figure 5.12 : Profil d'azote ammoniacal obtenus pour les cycles d'opération simulés (A : cycles 1,2,3 et témoin; B : cycles 4,5,6,7 et témoin)

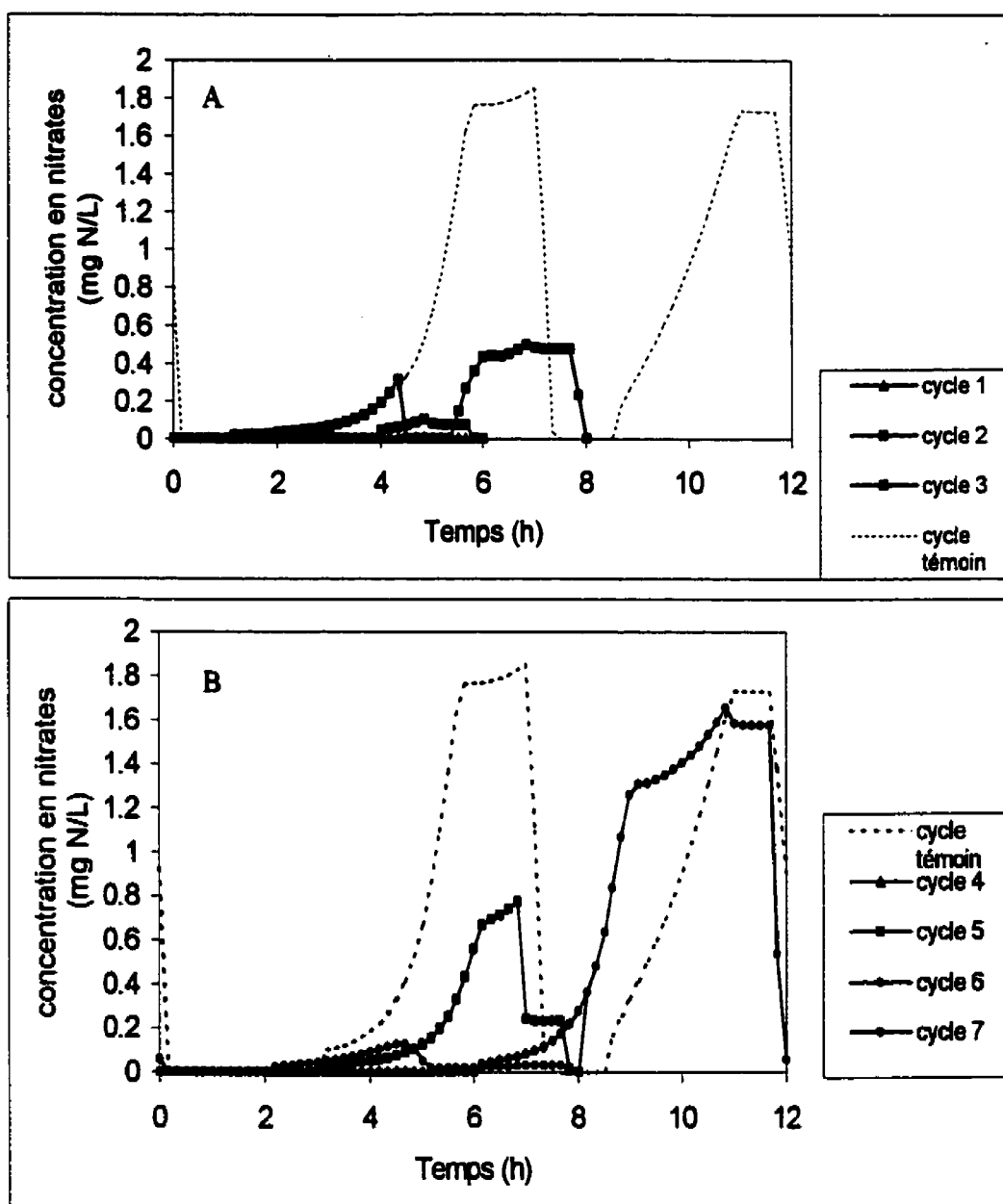


Figure 5.13 Profils de nitrates obtenus pour les cycles d'opération du RBS simulés (A : cycles 1,2,3 et témoin; B : cycles 4,5,6,7 et témoin)

5.4.2.2 Temps de rétention hydraulique

Les figures 5.14, 5.15 et 5.16 présentent les profils de phosphore, les concentrations maximales des composés de stockage des PAO (poly-P, PHA, glycogène), du phosphore précipité et les concentrations pseudo-stationnaires des biomasses déphosphatante et hétérotrophe.

À des TRH plus courts que 48 h (TRH = 28h, TRH = 32 h), l'efficacité de l'enlèvement du phosphore semble considérablement être réduite. La concentration résiduelle de phosphore est nettement plus élevée que pour les conditions témoin (36 mg P/L et 20 mg P/L vs 4,7 mg P/L). Les concentrations maximales des composés de stockage des PAO (poly-P, PHA, glycogène) et du phosphore précipité sont aussi considérablement réduites. La concentration de la biomasse déphosphatante est aussi nettement réduite alors que la concentration de la biomasse hétérotrophe semble moins sensible à une réduction du TRH.

Une augmentation du TRH de 32 h à 37 h induit une amélioration marquée dans l'efficacité de l'enlèvement du phosphore : la concentration de phosphore résiduelle n'est plus que de 5,3 mg P/L. Les concentrations des composés de stockage augmentent nettement: les concentrations maximales du PHA, du glycogène et des poly-P atteignent respectivement 590 mg DCO/L, 210 mg DCO/L et 185 mg P/L. La biomasse déphosphatante prédomine légèrement.

À un TRH de 48 h (correspondant aux "conditions témoin"), les concentrations en PHA, glycogène, poly-P et phosphore précipité ainsi que la concentration en biomasse déphosphatante, sont les plus élevées. La quantité de phosphore relargué est la plus importante ainsi que la quantité nette de phosphore recapté en conditions aérobies.

Augmenter le TRH à 56 h et à 75 h résulte en une diminution des concentrations maximales atteintes des composés de stockage (PHA, glycogène, poly-P) résultant en une

réduction de la concentration de la biomasse déphosphatante. La quantité de phosphore relargué est moindre. Les concentrations résultantes de phosphore résiduelles sont légèrement inférieures à celle obtenue pour un TRH de 48 h (4,1 mg P/L pour un TRH de 56 h et 4,2 mg P/L pour un TRH de 75 h vs 4,7 mg P/L pour un TRH de 48 h).

La tendance s'accroît davantage pour des TRH de 112 h et 223 h. Les concentrations des composés de stockage sont considérablement réduites ainsi que la concentration en biomasse déphosphatante. Les quantités de phosphore relargué et recapté sont aussi très diminuées. Les concentrations résiduelles de phosphore sont de 5,1 mg P/L pour un TRH de 112 h et de 8,6 mg P/L pour un TRH de 223 h, supérieures à celle des conditions témoin.

Ainsi, il existe un temps de rétention hydraulique optimal pour l'enlèvement du phosphore: de trop faibles TRH ne laissent pas assez de temps à la biomasse déphosphatante pour constituer ses composés de stockage résultant en une déphosphatation biologique très limitée. Des TRH trop longs portent aussi entrave à la déphosphatation biologique: comme la quantité de substrat (acétate) apportée par l'alimentation est réduite, la déphosphatation biologique ne se produit pas à sa capacité maximale. Parmi les TRH simulés, le TRH optimal, sur la base de la concentration résiduelle de phosphore à l'effluent, est de 56 h, correspondant à un débit d'alimentation par cycle de 400 L.

Cependant, ces résultats ne tiennent pas compte de l'enlèvement de l'azote. A titre indicatif, les profils d'azote ammoniacal et de nitrates obtenus pour différents TRH sont présentés dans les figures 5.17 et 5.18. L'azote ammoniacal est presque totalement consommé pour presque tous les TRH simulés (excepté pour un TRH de 32 h, où demeure une concentration résiduelle de 1,4 mg N/L). Les profils de nitrates simulés indiquent que la production de nitrates durant la première phase aérobie est minimale pour le TRH témoin. Il ne semble pas exister de corrélation entre le TRH et l'ampleur de

la nitrification, et il est donc difficile de tirer une conclusion concernant l'influence du TRH sur la nitrification

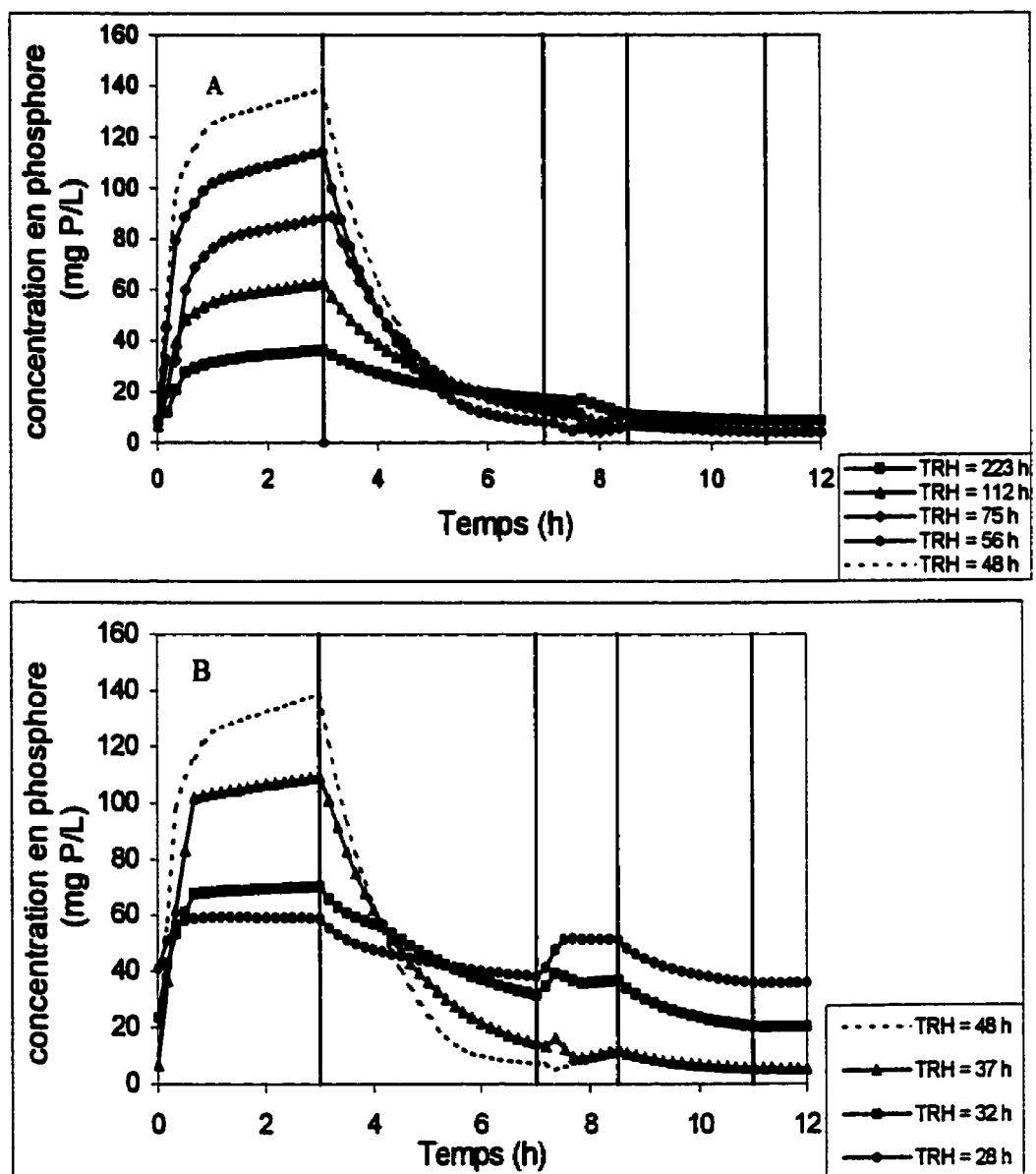


Figure 5.14 Profils de phosphore obtenus pour les TRH simulés (A: TRH > 48 h; B: TRH < 48 h)

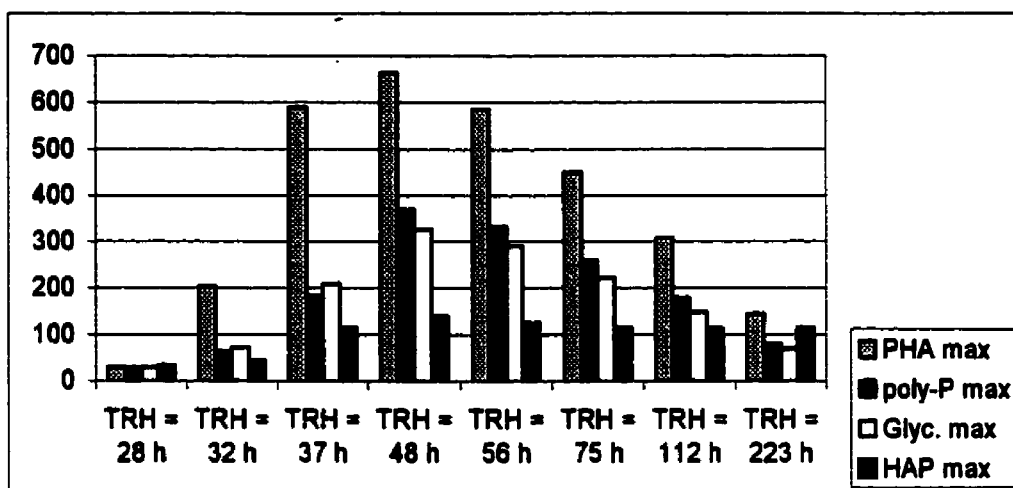


Figure 5.15 Concentrations maximales simulées des composés de stockage des PAO (PHA, glycogène, poly-P) et du phosphore précipité (hydroxyapatite) en mg DCO/L et en mg P/L pour les TRH simulés

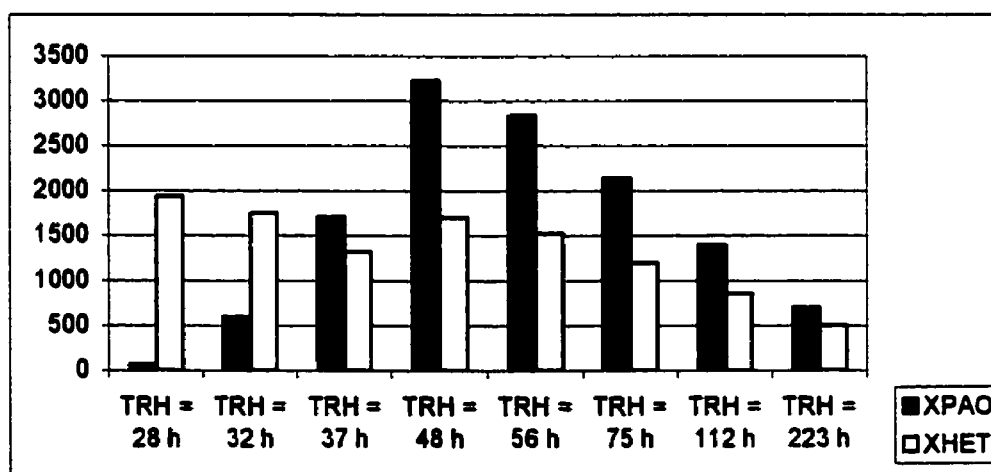


Figure 5.16 Répartition des biomasses hétérotrophe et déphosphatante (en mg DCO/L) pour les TRH simulés

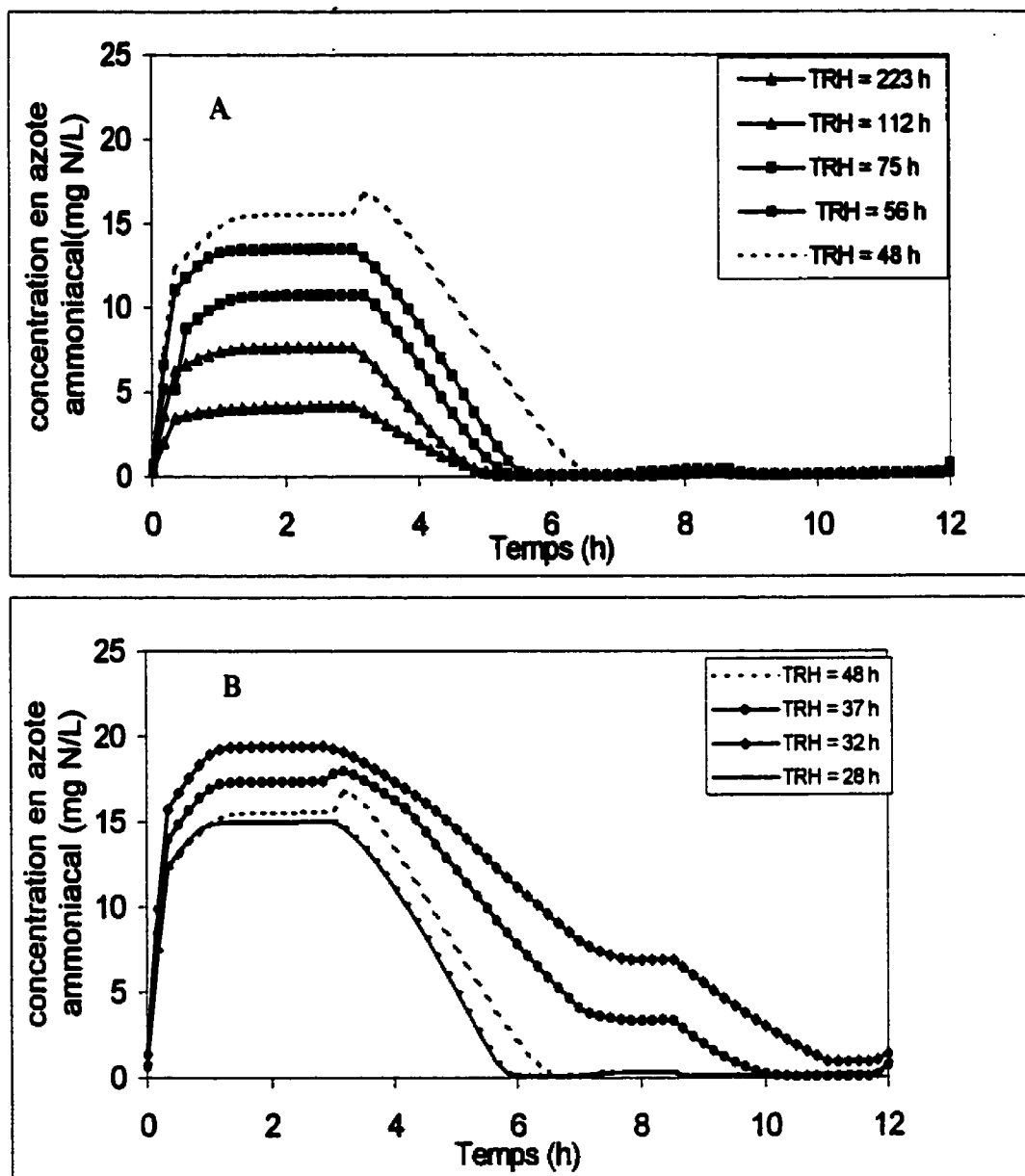


Figure 5.17 Profil d'azote ammoniacal obtenus pour les TRH simulés (A: TRH > 48 h; B: TRH > 48 h)

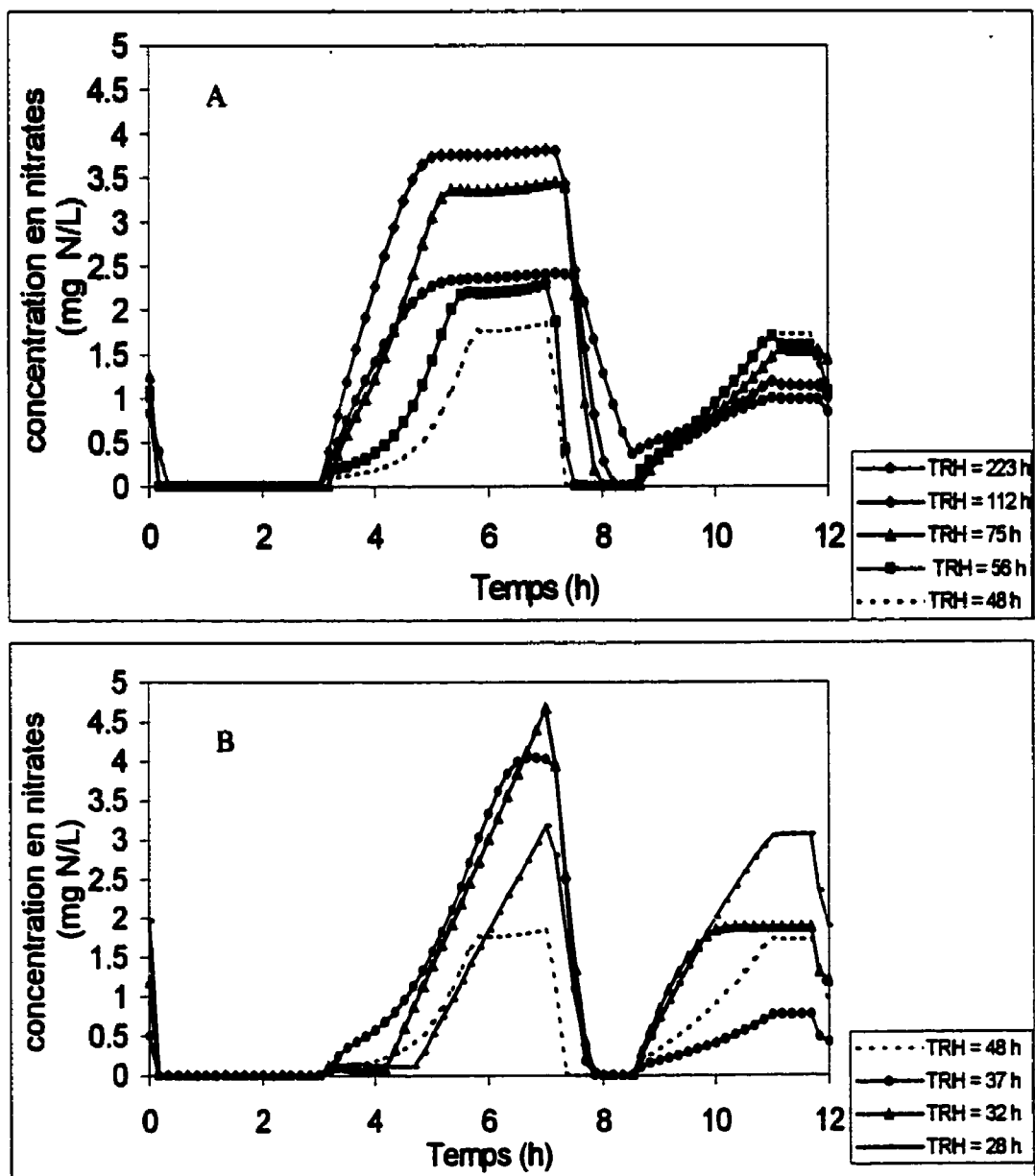


Figure 5.18 Profils de nitrates obtenus pour les TRH simulés (A: TRH > 48 h, B: TRH < 48 h)

5.4.2.3 Temps de rétention des boues

Les figures 5.19, 5.20 et 5.21 présentent les profils de phosphore, les concentrations maximales des composés de stockage des PAO (poly-P, PHA, glycogène), du phosphore précipité et les concentrations pseudo-stationnaires des biomasses déphosphatante et hétérotrophe pour les temps de rétention des boues simulés.

Une augmentation du TRB résulte en une augmentation notable de la concentration en poly-P (cf. Figure 5.20). La concentration en glycogène augmente aussi mais de manière moins marquée. Par contre, la concentration en PHA reste relativement inchangée. De plus, les concentrations des biomasses hétérotrophe et déphosphatante augmentent aussi, les proportions relatives étant relativement conservées. Le profil de phosphore demeure relativement inchangé pour des TRB plus longs que le TRB des conditions témoins (21 jours).

À de faibles TRB (4,7 et 6 jours), l'efficacité d'enlèvement du phosphore est nettement réduite: tel que présenté à la figure 5.21, la concentration de biomasse déphosphatante est considérablement diminuée. Les concentrations maximales atteintes des composés de stockage des PAO sont nettement plus faibles que pour les autres TRB simulés (cf. Figure 5.20). La quantité de phosphore relargué en conditions anaérobies est fortement diminuée. Les concentrations résiduelles de phosphore sont très élevées, de 20 mg P/L à un TRB de 4,7 jours et de 10 mg P/L pour un TRB de 6 jours.

Une augmentation du TRB de 6 jours à 9,5 jours a un effet drastique sur la production des composés de stockage: les concentrations maximales de PHA, de poly-P et de glycogène augmentent respectivement de 340 mg DCO/L à 660 mg DCO/L, de 110 à 190 mg P/L et de 120 à 230 mg DCO/L. La concentration de biomasse déphosphatante augmente de 1000 mg DCO/L à 2000 mg DCO/L. À un TRB de 9,5 jours, la biomasse déphosphatante devient ainsi nettement prédominante. La quantité de phosphore relargué en conditions anaérobies est aussi nettement plus élevée que pour de plus courts TRB. La

concentration résiduelle de phosphore n'est que de 4 mg P/L, inférieure à celle obtenue pour le TRB témoin de 21 jours.

Pour les TRB situés dans un intervalle de 9,5 à 16 jours, la concentration de PHA demeure quasiment inchangée (660 mg DCO/L), les concentrations de poly-P et de glycogène augmentent légèrement, et la concentration de biomasse déphosphatante augmente jusqu'à 3000 mg DCO/L. Les profils de phosphore sont très proches l'un de l'autre. La concentration résiduelle de phosphore est minimale (1,5 mg P/L) pour un TRB de 13 jours.

Parmi les TRB simulés, sur la base d'une concentration résiduelle de phosphore minimale, un TRB de 13 jours, correspondant à un débit purgé de 70 L par cycle, semble donc être optimal.

Cependant, ces résultats ne prennent pas en considération l'enlèvement de l'azote. A titre indicatif, les profils de l'azote ammoniacal et des nitrates obtenus pour différents TRB simulés sont présentés aux figures 5.22 et 5.23. Après un cycle, l'azote ammoniacal est totalement consommé pour tous les TRB simulés. Cependant, son taux de consommation est fortement ralenti pour de faibles TRB (4,7 jours et 6 jours). Les profils de nitrates simulés pour différents TRB ne semblent pas être très cohérents, la nitrification pouvant s'effectuer à de faibles TRB.

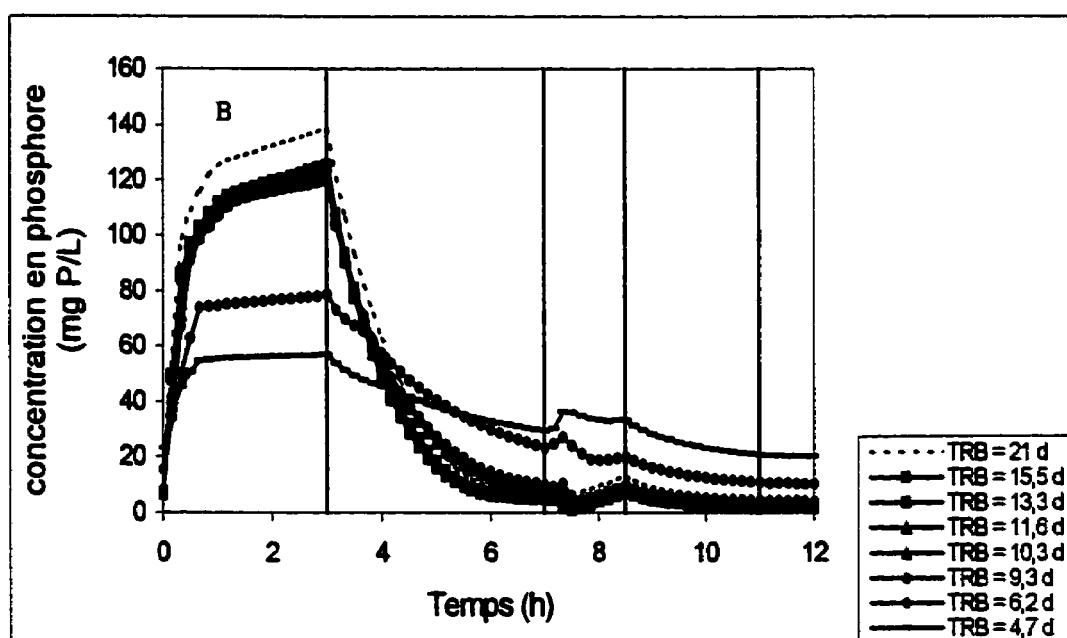
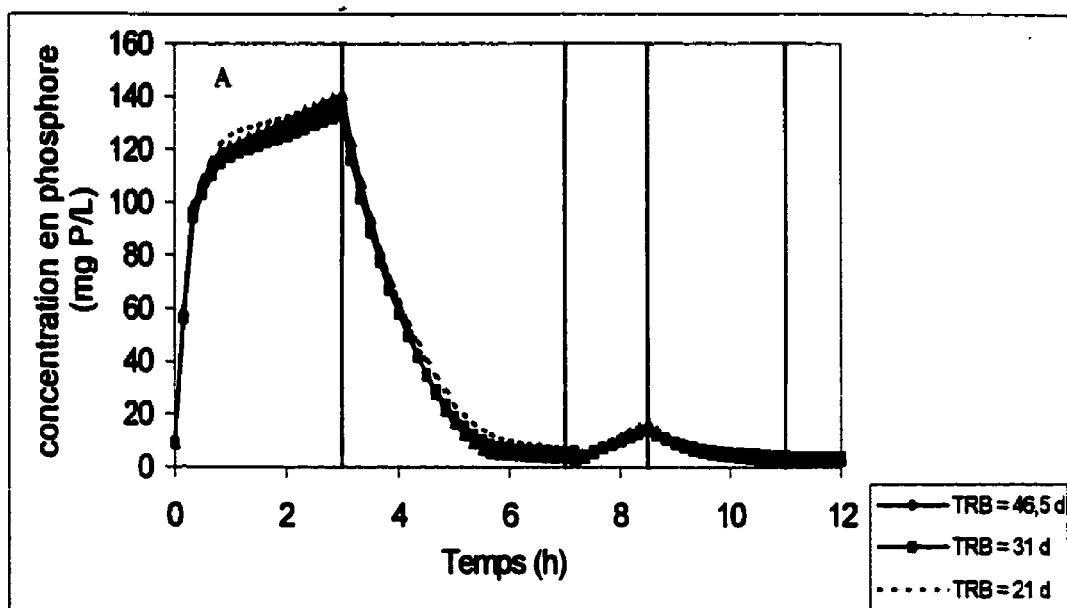


Figure 5.19 Profils de phosphore simulés pour les TRB simulés (A: TRB > 21 jours, B: TRB < 21 jours)

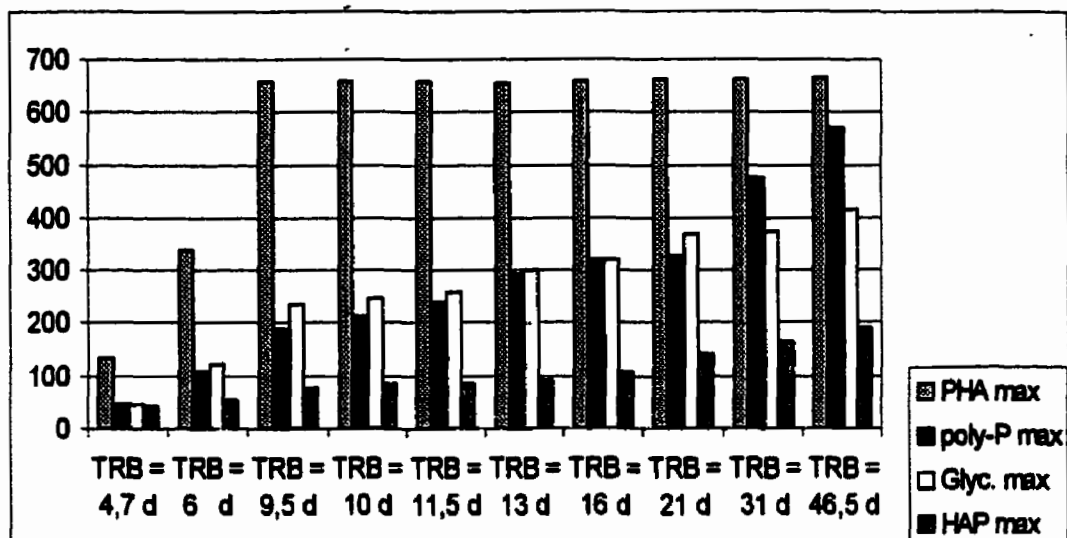


Figure 5.20 Concentrations maximales simulées des composés de stockage des PAO (PHA, glycogène, poly-P) et du phosphore précipité (hydroxyapatite) en mg DCO/L et en mg P/L, pour les TRB simulés

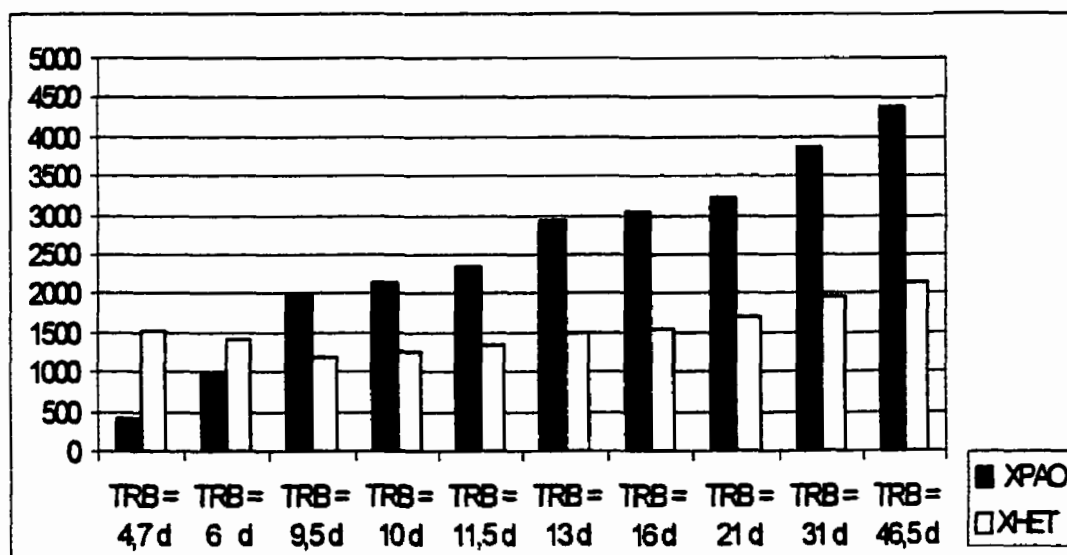


Figure 5.21 Répartition des biomasses déphosphatante et hétérotrophe pour les TRB simulés (en mg DCO/L)

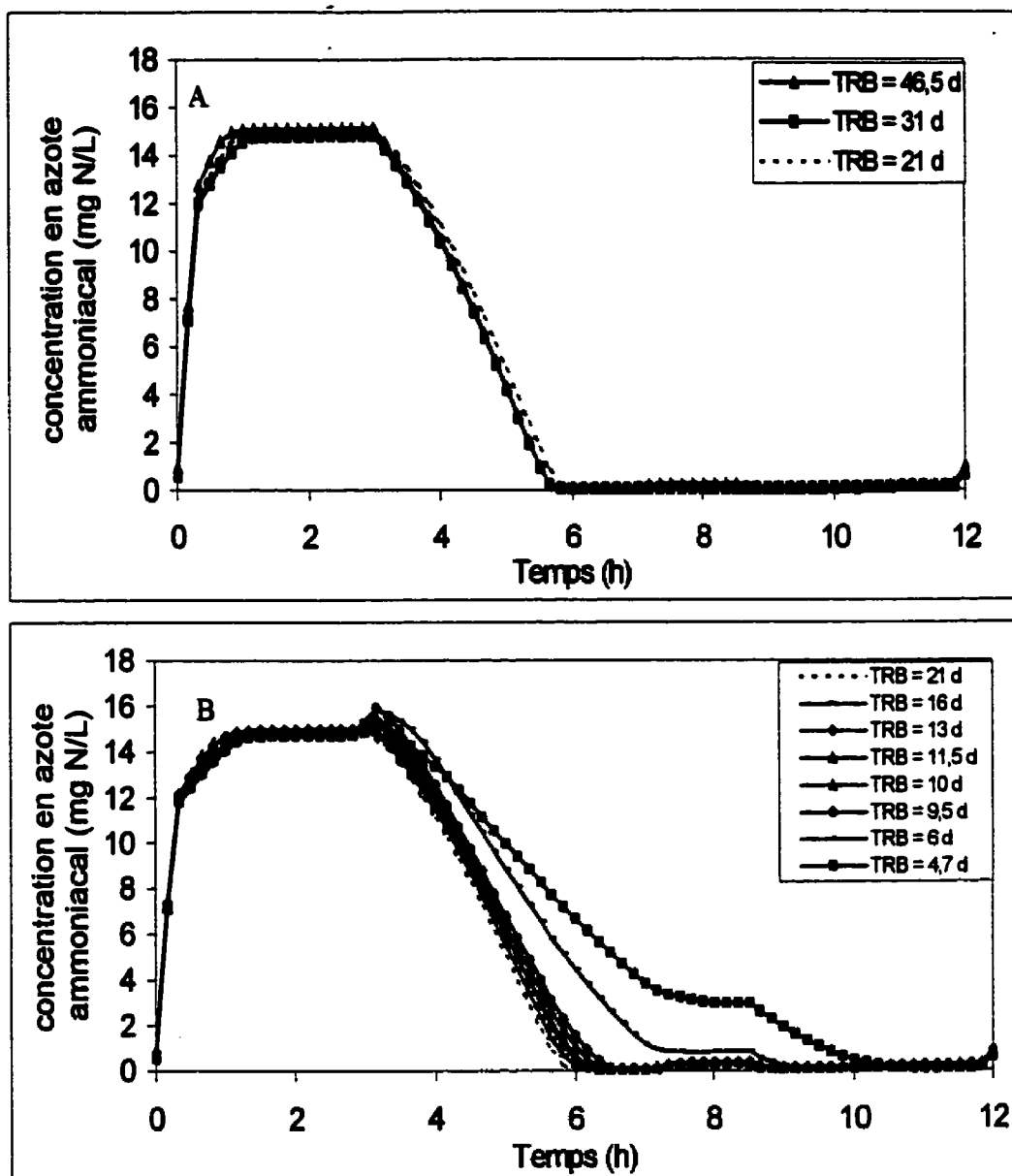


Figure 5.22 Profils d'azote ammoniacal obtenus pour les TRB simulés (A: TRB > 21 jours, B: TRB < 21 jours)

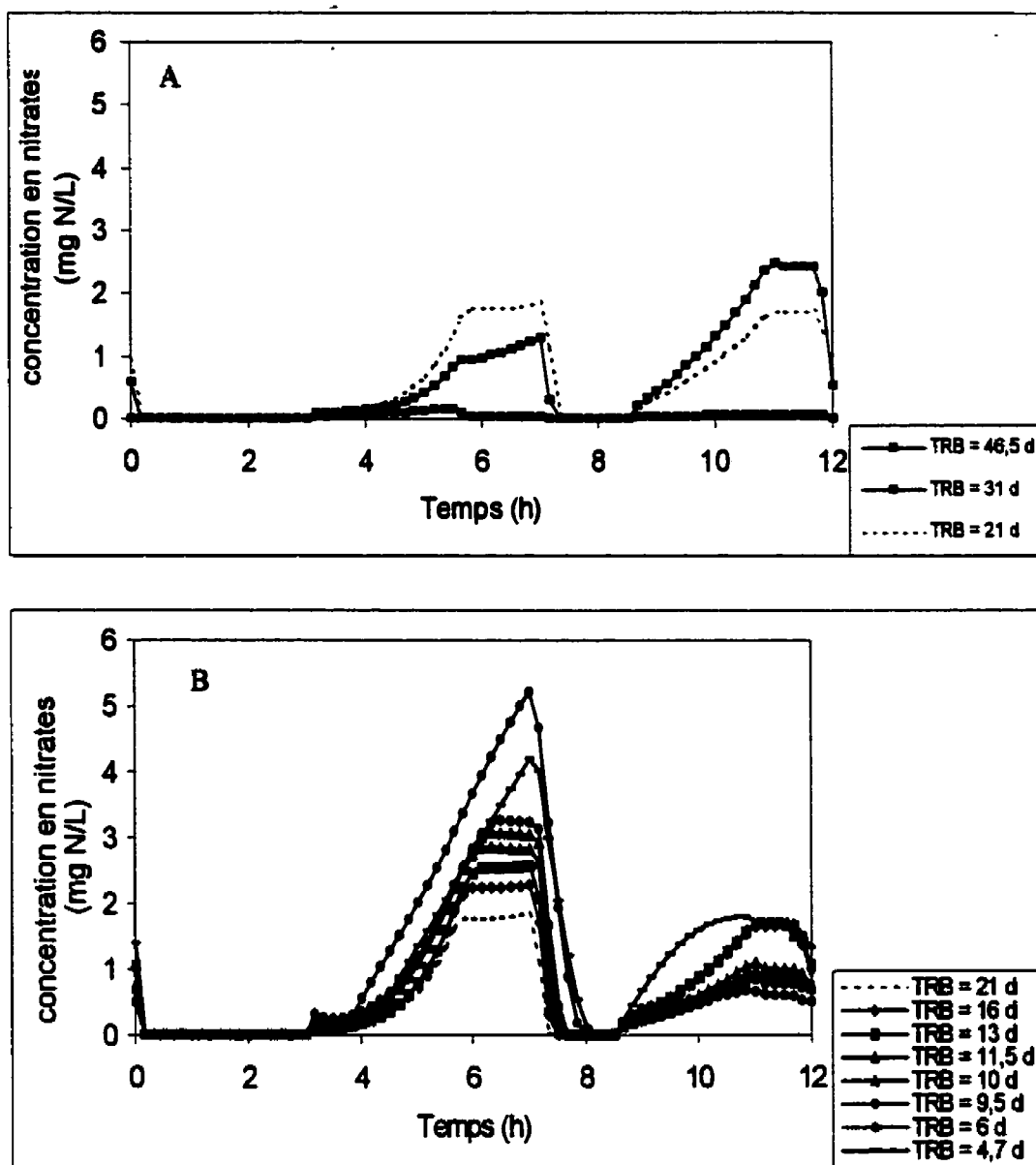


Figure 5.23 : Profils de nitrates obtenus pour les TRB simulés (A : TRB > 21 jours, B : TRB < 21 jours)

5.5 Synthèse et conclusion

Un tableau résumé des conditions simulées ainsi que les principaux résultats sont présentés dans le tableau 5.7.

Un poids important a été accordé au magnésium dans cette étude de modélisation. En effet, à une concentration affluente de magnésium de 15 mg P/L, le phosphore est totalement consommé. Bien qu'il soit possible que la carence en magnésium explique qu'il demeure une concentration résiduelle de phosphore, il est également possible que d'autres facteurs expliquent qu'il demeure une concentration résiduelle de phosphore, tels la présence éventuelle de bactéries GAO ou une éventuelle limitation en PHA.

La modélisation du rôle du magnésium dans la bio-P devrait être améliorée. En effet une concentration affluente de magnésium nulle devrait fortement nuire à la bio-P, sinon quasiment l'inhiber. Or, ceci ne correspond pas aux résultats simulés: à une concentration nulle de magnésium à l'affluent, l'enlèvement du phosphore est diminué, mais encore appréciable (concentration résiduelle de 9,5 mg P/L). Cette surestimation de l'enlèvement du phosphore en absence de magnésium à l'affluent provient de la manière dont le taux de réaction de la concentration en magnésium a été modélisé, comme étant directement proportionnel au taux de réaction du phosphore. Cet aspect est couvert plus en détail dans le chapitre VI.

Une augmentation de la quantité d'acétate à l'affluent favorise nettement la bio-P. En effet, un accroissement de la concentration en acétate résulte en une production accrue de PHA et par conséquent, en une production accrue de biomasse déphosphatante. Les résultats indiquent aussi qu'il existerait une concentration seuil d'acétate (500 mg DCO/L) à partir de laquelle la biomasse déphosphatante prédominerait. En pratique, les AGV présents dans l'effluent du fermenteur-pilote ne sont pas composés seulement d'acétate, mais d'un mélange d'acétate, de propionate et de butyrate. Il aurait été

intéressant d'étudier la performance de la bio-P pour différentes répartitions de ces AGV mais les modèles actuels ne prennent en considération que l'acétate.

La cyclologie "témoin", d'une durée de 12 heures et composée de 5 phases, ne représente pas nécessairement la cyclologie optimale, sur la base de la concentration résiduelle de phosphore à l'effluent. La durée totale de la cyclologie pourrait être raccourcie et les deuxièmes phases non aérée et aérée ne seraient pas absolument nécessaires. En effet, des concentrations résiduelles de phosphore quasi-similaires sont obtenues avec des cycles de 6 heures et de 8 heures composés de 5 phases, et des concentrations nettement plus faibles sont obtenues avec des cyclologies de 8 heures et de 12 heures composés de seulement 2 phases (cycles 5 et 7). De plus, opérer le RBS avec une cyclologie de 6 heures ou de 8 heures pourrait permettre de traiter une charge quotidienne de phosphore plus importante. Cependant, ces résultats ne tiennent pas compte de l'enlèvement de l'azote. Les profils d'azote ammoniacal obtenus pour différents cycles d'opération montrent que l'azote ammoniacal s'accumulerait pour certains cycles d'opération (cycles 1,2 et 4), tous d'une durée de 6 heures, mais serait totalement consommé pour les autres cycles simulés. Comme le profil de nitrates simulé pour des conditions témoin ne suit pas bien le profil expérimental – une nitrification s'effectuant de manière appréciable durant la dernière phase aérobie – les profils de nitrates simulés sont difficilement interprétables.

Des TRH trop courts empêchent une production suffisante des composés de stockage alors que des TRH trop longs réduisent la disponibilité en acétate. Parmi les TRH simulés, le TRH optimal, sur la base de la concentration résiduelle de phosphore, est de 56 heures, correspondant à un débit alimenté de 400 L par cycle, soit légèrement inférieur au débit alimenté expérimental de 465 L par cycle. Cependant, les résultats ne tiennent pas compte de l'enlèvement de l'azote : les profils d'azote ammoniacal obtenus indiquent que l'azote ammoniacal serait consommé pour tous les TRH simulés, excepté pour un TRH de 32 h. Le TRH aurait une influence sur l'ampleur de l'ammonification et sur la cinétique de consommation de l'azote ammoniacal; l'évolution du profil d'azote ammoniacal avec le TRH suggérerait qu'une diminution dans le TRH entraînerait plus

d'ammonification. L'augmentation de l'ammonification associée à une diminution du TRH pourrait s'expliquer par la quantité plus importante de substrat hydrolysable apportée par un débit d'alimentation plus élevé. Toutefois, un TRH de 28 heures entraîne moins d'ammonification qu'un TRH de 48 h. À de faibles TRH (28 h, 32 h) et à de très longs TRH (112 h, 223 h), la cinétique de consommation de l'azote ammoniacal semble ralentie par rapport à celle observée pour les conditions témoin.

De trop courts TRB ne permettent pas une production suffisante de composés de stockage. Des TRB plus longs que le TRB « témoin » de 21 jours ne résultent pas en une amélioration marquée de l'enlèvement du phosphore. Parmi les TRB simulés, le TRB optimal, sur la base de la concentration résiduelle de phosphore, serait de 13 jours, correspondant à un débit purgé de 70 L par cycle, soit supérieur au débit purgé expérimental de 45 L par cycle.

L'enlèvement de l'azote ammoniacal et la nitrification n'ont toutefois pas été considérés pour définir le terme « optimal ». Les profils d'azote ammoniacal indiquent que celui-ci pourrait être totalement consommé pour tous les TRB simulés. Cependant, une diminution du TRB ralentirait le taux de consommation de l'azote ammoniacal. Les profils de nitrates obtenus pour différents TRB sont difficilement interprétables: en effet, la nitrification maximale est atteinte à un TRB de 6 jours, ce qui ne correspond pas aux critères de conception présentés dans la littérature, qui recommandent pour la nitrification un TRB de l'ordre de 10 à 30 jours (Comeau, 1990b). De plus, la nitrification ne semble pas être favorisée par des TRB plus longs (31 jours, 46,5 jours). Elle est même complètement inhibée à un TRB de 31 jours. Ainsi, la "réponse" prédite des nitrates face à un changement du TRB ne paraît pas très cohérente, et révèle que la calibration du modèle devrait être améliorée afin de mieux prédire la nitrification.

Ainsi, l'influence de certaines conditions affluentes sur la bio-P put être identifiée et des conditions d'opération optimales pour l'enlèvement du phosphore purent être définies à

travers cette succincte étude d'optimisation. Cependant, les résultats sont à considérer avec précaution et devraient être interprétés comme des tendances relatives. De plus, le terme « optimal » n'a été défini que sur la base de la concentration résiduelle de phosphore, alors qu'à grande échelle, d'autres facteurs devraient être considérés, tels la nitrification ou la capacité maximale d'une éventuelle unité de traitement des boues en aval du RBS.

Néanmoins, l'approche d'optimisation proposée pourrait éventuellement donner quelques pistes pour des études de « design expérimental » visant à optimiser l'enlèvement du phosphore.

Tableau 5.7 Résumé des conditions simulées et des principaux résultats

Effet étudié	Conditions simulées	Effet sur la bio-P
Concentrations à l'affluent		
Magnésium (mg/L) [Mg] _{exp} = 7,8	[Mg] = 0, 5	-
	[Mg] = 10;	+
	[Mg] = 15	+ conc.min de o-PO ₄
Acétate (mg DCO/L) [HAc] _{exp} = 1182	[HAc] = 0, 100, 300, 500, 700	-
	[HAc] > 1182 mg DCO/L	-
	[HAc] = 1500 mg DCO/L	+ conc. min de o-PO ₄
Conditions opérationnelles		
Cyclologie du RBS (h)		
Cycle exp. : 3/4/1, 5/2, 5/1 NA1/O ₂ -1/NA-2/O ₂ -2/SDI	Cycle 1 : 1,36/1,8/0,68/1,14/1	-
	Cycle 2 : 1/2,16/0,68/1,14/1	+
	Cycle 3 : 1,91/2,5/1/1,59/1	+
	Cycle 4 : 3/2/1	-
	Cycle 5 : 4/3/1	+ cyclologie optimale pour le P
	Cycle 6 : 2/5/1	-
	Cycle 7 : 6/5/1	+
TRH (h) TRH _{exp} = 48	TRH = 28; 32; 112; 223	-
	TRH = 37; 75	+
	TRH = 56	+ TRH optimal
TRB (d) TRB _{exp} = 21	TRB = 4,5; 6	-
	TRB = 9; 10,5; 11,5; 16; 31; 46,5	+
	TRB = 13	+ TRB optimal

Notes :

- « + » signifie que la concentration résiduelle de phosphate simulée à l'effluent est inférieure à la « concentration témoin » de 6,4 mg P/L obtenue au jour 120, « - » signifie qu'elle est supérieure.
- Condition "optimale": permet d'atteindre la concentration de phosphate minimale à l'effluent parmi les conditions simulées
- Pour les cycles composés de 5 phases, la séquence correspond à : phase non aérée/phase aérée/phase non aérée/phase aérée/phase de sédimentation/évacuation et attente, abrégés : NA1/O₂-1/NA2/O₂-2/SDI
- Pour les cycles composés de 3 phases, la séquence correspond à : NA/O₂/SDI

CHAPITRE VI

ÉTUDES COMPLÉMENTAIRES

Certains aspects du modèle à approfondir ont été mis en relief dans les chapitres précédents. Ce chapitre vise à les rappeler et présente quelques pistes à suivre afin d'améliorer la capacité prédictive du modèle.

6.1 Modélisation du magnésium

La modélisation du rôle du magnésium dans la bio-P devrait être améliorée. En effet, le modèle utilisé dans les chapitres précédents prévoit un enlèvement de phosphore même lorsque la concentration affluente de magnésium est nulle, ce qui contredit les études effectuées à ce sujet (Comeau *et al.*, 1987; Rickard et McClintock, 1992). Le taux de réaction du magnésium ayant été modélisé comme étant directement proportionnel au taux de réaction du phosphore, et la fonction de saturation du magnésium ne portant que sur la réaction de synthèse aérobie/anoxie des poly-P, il en résulte que même pour une concentration initiale de magnésium nulle, un relargage anaérobie de phosphore s'effectue et génère du magnésium. Le bilan de magnésium ne clôt donc pas.

Une solution proposée consisterait à inclure la fonction de saturation du magnésium dans toutes les réactions impliquant le phosphore. La même série de simulations pour la concentration affluente de magnésium fut effectuée en incluant ces changements. Les profils de phosphore obtenus sont présentés dans la figure 6.1, et les concentrations maximales des composés de stockage des PAO, ainsi que du phosphore précipité, sont présentées dans la figure 6.2.

Cette solution permet effectivement de prévenir tout enlèvement du phosphore quand la concentration de magnésium à l'affluent est nulle. Avec ces changements, la concentration résiduelle de phosphore est systématiquement plus élevée et singulièrement, la production en PHA est considérablement plus élevée, atteignant jusqu'à 3500 mg DCO/L pour une concentration affluente de magnésium de 5 mg/L. Ce dernier phénomène peut éventuellement s'expliquer par la diminution du taux de lyse aérobie de PHA résultant de l'inclusion de la fonction "MSMgPAO" dans l'équation correspondante. Bien que permettant d'inhiber la bio-P à une concentration affluente de magnésium nulle, cette approche donne peut-être un poids excessif au magnésium. Afin de modéliser plus rigoureusement le rôle du magnésium dans la bio-P, il serait fortement recommandé de revoir l'approche de modélisation du magnésium.

Les observations suivantes pourraient guider les changements à apporter pour modéliser correctement le rôle du magnésium dans la bio-P :

Dans le modèle présenté dans ce mémoire, le magnésium a été modélisé ainsi :

$dsmgdt = k_1 dSPO_4dt$, où $k_1 = 0,157 \text{ g Mg/g P}$. L'équation exacte devrait en fait être : $dsmgdt = smg_{in} - smg_{out} + k_1 dSPO_4dt$, où smg_{in} représente la concentration affluente de magnésium et smg_{out} , la concentration de magnésium à l'effluent.

De plus, le magnésium a été associé à toute réaction impliquant le phosphore, en utilisant le même rapport (phosphore sur magnésium) de 0,157 g Mg/g P. Cette approche répond plus à une commodité mathématique, mais aurait avantage à être revue pour être fidèle à la réalité des processus décrits dans le modèle.

Les résultats obtenus à une concentration nulle de magnésium montrent aussi le danger d'inclure une variable d'état dépendante d'une autre dans un modèle. De plus, la constante de saturation proposée pour le magnésium n'a été déterminée que pour les données d'un seul suivi intensif. Les termes ajoutés au modèle pour tenir compte du magnésium doivent donc être considérés comme semi-empiriques, et peuvent éventuellement être ajustés selon les conditions expérimentales.

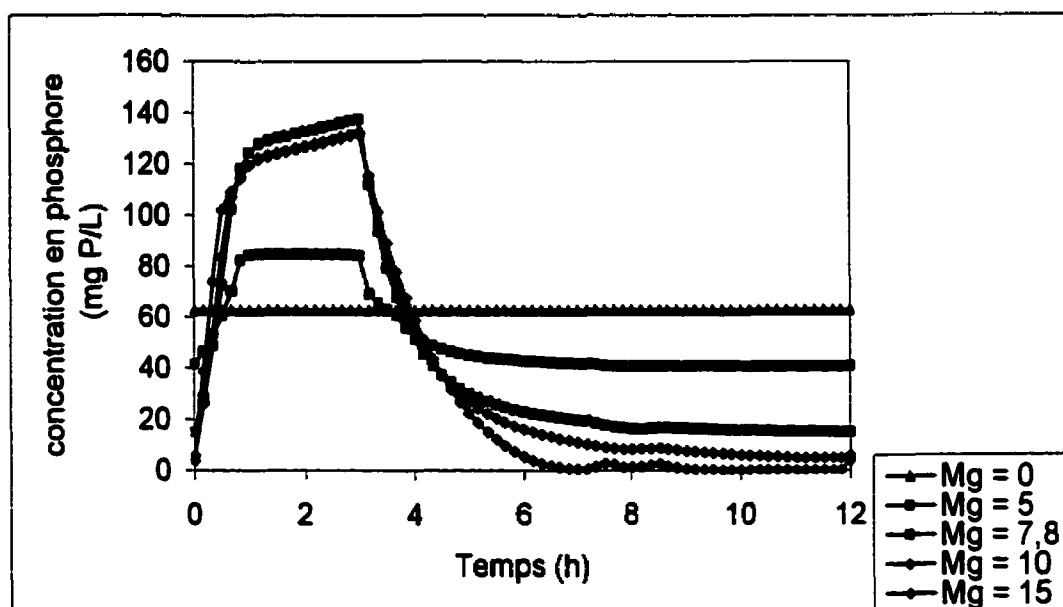


Figure 6.1 : Profils de phosphore obtenus par simulation pour différentes concentrations affluentes de magnésium (mg/L)

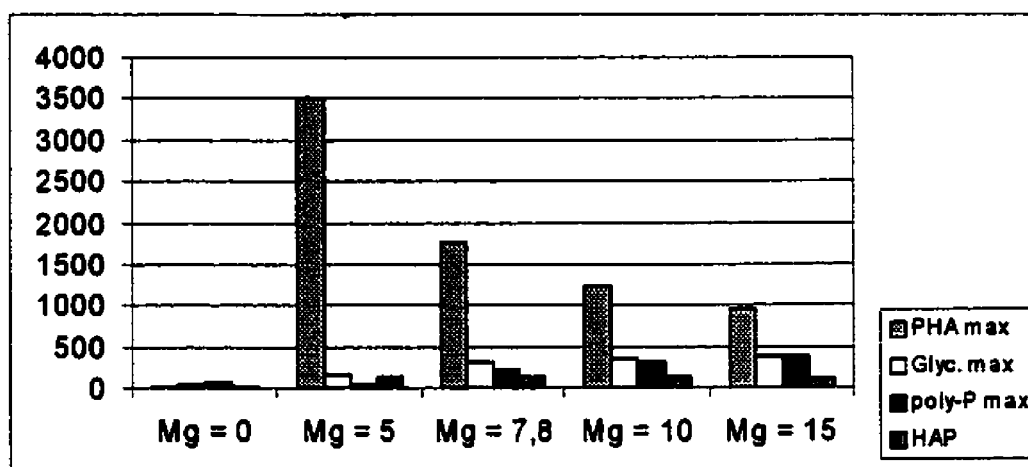


Figure 6.2 : Concentrations maximales du PHA (mg DCO/L) , poly-P (mg P/L), glycogène (mg DCO/L) et du phosphore précipité (mg P/L) pour différentes concentrations affluentes de magnésium simulées

6.2 Modélisation de l'azote ammoniacal et des nitrates

La modélisation de l'azote ammoniacal et des nitrates doit être améliorée d'autant plus que les nitrates interviennent également dans les réactions de déphosphatation biologique. Les profils d'azote ammoniacal et de nitrates obtenus diffèrent entre Matlab et GPS-X : la production de nitrates est bien plus élevée sur Matlab que sur GPS-X et la cinétique de nitrification obtenue sur GPS-X est nettement inférieure à celle obtenue sur Matlab.

Les causes de ces différences majeures n'ont pu être élucidées et devraient être identifiées.

Sur les deux logiciels, une nitrification s'effectue durant la deuxième phase aérée du cycle. En effet, par simulation, la concentration d'azote ammoniacal résiduelle n'atteint pas 0 à la fin de la première période aérée et une ammonification se poursuit pendant la deuxième phase non aérée, contrairement à ce qui est observé expérimentalement. L'azote ammoniacal résiduel permet donc une nitrification durant la dernière phase aérée.

D'après les simulations effectuées sur GPS-X, l'azote ammoniacal semble s'accumuler pour des cycles d'une durée de 6 heures. La cause reliant la durée d'un cycle et le profil d'azote ammoniacal devrait être identifiée : provient-elle d'un problème numérique ou alors correspond t-elle vraiment à une réalité physique?

Les profils de nitrates obtenus pour différentes conditions opérationnelles sont difficilement interprétables. Les résultats obtenus pour différents TRB ne correspondent aucunement à ce qui est observé expérimentalement : en effet, la nitrification pourrait s'effectuer à très faibles âges de boues.

Afin de mieux comprendre le comportement de l'azote ammoniacal et des nitrates, il serait recommandé d'identifier les composantes de chaque taux de réaction pour chaque simulation, de vérifier quels sont les paramètres associés aux nitrates sensibles à une variation des conditions d'opération. Suite à cette vérification, la nature du problème de prédiction de l'azote ammoniacal et des nitrates devrait pouvoir être identifié (par exemple: problème dans l'algorithme de calcul). Éventuellement, les paramètres relatifs à l'azote ammoniacal et aux nitrates, en particulier ceux associés à la biomasse autotrophe, devraient être réajustés.

6.3 Autres aspects à améliorer

6.3.1 Problèmes numériques

Le modèle intégré dans Matlab a permis de calibrer le modèle à partir des données expérimentales du jour 120 mais, dans sa forme actuelle, est limité dans sa flexibilité. En effet, il fut constaté qu'un changement minime (ex : concentration affluente d'acétate) suffisait à perturber la stabilité numérique du système d'équations. Actuellement, la convergence ne semble s'effectuer que sur une gamme limitée de conditions. Des routines devraient être ajoutées dans le programme afin de rendre plus robuste le modèle intégré dans Matlab.

6.3.2 Rôle du PHA

Un poids très important a été accordé au magnésium afin d'expliquer le fait qu'il demeure une concentration résiduelle de phosphore. Le ralentissement dans le taux de recaptage du phosphore en conditions aérobies a été uniquement attribué à la carence en magnésium. Cependant, il est possible que d'autres facteurs provoquent ce ralentissement, tel qu'une éventuelle limitation en PHA (Meinhold *et al.*, 1998). Éventuellement, l'effet de ces autres facteurs devrait être aussi représenté dans le modèle.

La concentration résiduelle de PHA observée expérimentalement à la fin d'un cycle correspond peut-être à une fraction en PHA minimale non disponible par les bactéries bio-P pour leur croissance. Afin d'améliorer la prédiction du PHA du modèle, une fonction tenant compte de cette fraction minimale en PHA devrait éventuellement être incluse, par exemple dans l'équation du taux de consommation du PHA. Cette fonction d'inhibition pourrait par exemple être du type :

$$I_{\text{phaminPAO}} = (f_{\text{phaPAO}} - f_{\text{phaminPAO}}) / (k_{\text{phainhPAO}} + f_{\text{phaPAO}}),$$

Où f_{phaPAO} représente la fraction de PHA contenu dans les bactéries déphosphatantes, $f_{\text{phaminPAO}}$, la fraction minimale de PHA et $k_{\text{phainhPAO}}$, une constante d'inhibition.

6.3.3 Effet de la température

L'effet de la température n'a pas été inclus dans ce modèle. Tous les paramètres « par défaut » du modèle sont normalement valides pour une température de 20°C. À l'échelle pilote, la température de la liqueur mixte atteint pourtant 27°C. Une différence de température de 20 à 27°C pourrait affecter différemment les réactions du modèle. D'après Brdjanovic(1998) et Baetens *et al.*(1999), la stœchiométrie des réactions associées à la bio-P ne serait pas affectée par une augmentation de la température mais par contre, la cinétique des réactions le serait. Selon les expériences réalisées par

Brdjanovic (1998), le taux de certaines réactions associées à la bio-P semble plafonner à une température située entre 20 et 30°C (ex : taux de consommation d'acétate en conditions anaérobies, taux de consommation du PHA en conditions aérobies ou anoxies) alors que le taux d'autres réactions (ex : taux de recaptage du phosphore) est nettement plus élevé à 30°C.

La température pourrait aussi également avoir une influence primordiale sur les taux des réactions de précipitation calcique. En effet, d'après les valeurs par défaut proposées dans le modèle de Maurer *et al.*(1999), les taux de précipitation du HDP (hydroxycalciumdiphosphate) et de l'hydroxyapatite diminueraient avec un accroissement de la température.

6.4 Conclusion

Les principales recommandations pour améliorer le modèle sont donc :

- d'améliorer la modélisation du magnésium afin d'étendre le seuil de validité du modèle à toute concentration affluente de magnésium et prévoir une inhibition de la bio-P dans des conditions de carence sévère de magnésium,
- d'améliorer la modélisation de l'azote ammoniacal et des nitrates en identifiant les causes des différences observées entre Matlab et GPS-X et éventuellement en complétant la calibration actuelle. De plus, en fonction des ajustements effectués sur l'azote ammoniacal et les nitrates, la calibration du phosphore devrait éventuellement être rajustée,
- de réajuster éventuellement certains taux de réaction afin de tenir compte de l'effet de la température,
- de rendre le système de résolution sur Matlab plus robuste,
- d'élucider les causes (numériques?) des différences de comportement du modèle intégré dans Matlab et GPS-X.

CONCLUSION GÉNÉRALE

Le principal objectif de ce projet visait à modéliser l'enlèvement du phosphore d'un effluent industriel traité par un réacteur biologique séquentiel en utilisant une synthèse des modèles ASM3, TUD, et de Maurer *et al.*. Le modèle résultant fut adapté afin de tenir compte de l'effet d'une carence en magnésium sur la déphosphatation biologique. Dans un premier temps, le modèle fut développé à l'aide du logiciel Matlab 5.3. Les données expérimentales utilisées pour la calibration du modèle provenaient d'un suivi intensif effectué durant une période d'opération du RBS pilote relativement stable. Les valeurs de quatre paramètres (Y_{PO4} : phosphore relargué par acétate consommé, Y_{PHA0} et Y_{PHANO} : PHA consommé sur biomasse formée en conditions aérobies et anoxies, k_{PP} : taux de synthèse des poly-P en conditions aérobies) furent ajustées afin d'améliorer l'adéquation entre les profils de phosphore simulé et expérimental. Le profil de phosphore simulé final est très proche du profil expérimental. Les concentrations maximales de PHA et de poly-P sont aussi assez proches des concentrations expérimentales. Le modèle fut ensuite intégré dans le logiciel GPS-X 2.4.1 afin de comparer les résultats obtenus avec les deux logiciels, et de tester le modèle sur une gamme étendue de concentrations affluentes (magnésium, acétate) et de conditions opérationnelles (cyclologie du RBS, TRH, TRB). Les profils de phosphore simulés sur les deux logiciels sont assez proches mais sur GPS-X, la quantité de poly-P synthétisée excède nettement celle prédite sur Matlab alors que la quantité de phosphore précipitée est inférieure. Les causes de ces différences n'ont pu être élucidées.

Les analyses de sensibilité menées sur GPS-X révélèrent que:

- la modélisation du magnésium devrait être améliorée. En effet, une concentration affluente nulle de magnésium devrait être fortement préjudiciable à la déphosphatation biologique, contrairement à ce que les résultats de simulation suggèrent.

- l'augmentation de la concentration d'acétate affluente favorise nettement la déphosphatation biologique.
- Des cyclologies composées de 5 phases et d'une durée de 6 et de 8 heures peuvent être tout aussi efficaces que la cyclologie utilisée, et des cyclologies de seulement 2 phases, et d'une durée de 12 heures et de 8 heures, résultent même en une concentration résiduelle de phosphore nettement inférieure.
- Le temps de rétention hydraulique optimal (sur la base de la concentration résiduelle de phosphore) se situerait autour de 56 heures, soit supérieur au TRH expérimental de 48 heures.
- Le temps de rétention des boues optimal (sur la base de la concentration résiduelle de phosphore) se situerait autour de 13 jours, soit inférieur au TRB expérimental de 21 jours.

Ainsi, il fut montré dans ce projet que des modèles utilisés plus couramment sur des effluents synthétiques ou municipaux donnaient, avec relativement peu d'ajustements sur les paramètres, un potentiel prédictif intéressant pour un effluent industriel, dont les charges en phosphore sont environ 10 fois plus élevées que pour les effluents municipaux. Un exemple de l'utilité de la modélisation appliquée à un effluent industriel traité par RBS fut illustré à travers une série d'analyses de sensibilité. La modélisation appliquée à un effluent industriel pourrait s'avérer fort utile, tout aussi bien pour des études de faisabilité que pour des études d'optimisation de stations de traitement existantes.

Cependant, les résultats obtenus dans cette étude doivent être considérés avec précaution, et nécessiteraient une plus ample validation. En effet, un poids considérable a été donné aux données d'un seul suivi intensif du RBS pilote, les autres suivis intensifs ne correspondant pas à une période de stabilité d'opération. De plus, le manque de données expérimentales pour un composé de stockage d'importance majeure, le glycogène, n'a permis qu'une calibration partielle du modèle. Les ajustements effectués sur les paramètres se doivent d'être considérés avec précaution; en effet, un modèle si complexe,

composé de 24 composés et de 30 équations, rend la calibration difficile. La combinaison finale de paramètres ajustés pourrait ne représenter qu'une combinaison parmi d'autres possibles. Les modèles complets permettent de gagner en capacité prédictive mais en contrepartie, sont dotés d'une structure plus complexe. Dans ce sens, les résultats d'analyses de sensibilité doivent être interprétés seulement de manière semi-quantitative, en termes de tendances relatives. Néanmoins, l'approche proposée pourrait servir de base à des études de "design expérimental" visant à optimiser l'enlèvement du phosphore.

RECOMMANDATIONS

Un poids important a été attribué aux GAO et au rôle d'AGV autres que l'acétate afin de justifier la calibration du profil de phosphore. Il serait donc recommandé de poursuivre des études visant à mieux comprendre les conditions favorisant l'apparition de ces bactéries, et de développer des méthodes pour les quantifier. Il serait aussi intéressant de mieux élucider le rôle du propionate et du butyrate dans la déphosphatation biologique.

La modélisation du magnésium devrait être améliorée afin de représenter correctement l'effet inhibiteur d'une concentration affluente de magnésium nulle sur la bio-P. Les solutions proposées dans le chapitre VI constituent une première approche.

Le ralentissement du taux de recaptage du phosphore en conditions aérobies a été uniquement attribué à la carence en magnésium. Or, d'autres facteurs pourraient aussi intervenir, tels qu'une éventuelle limitation en PHA.

La calibration du modèle s'est orientée de manière à obtenir la meilleure adéquation possible entre le profil expérimental et le profil simulé de phosphore, et la meilleure prédiction possible des composés de stockage des PAO, par rapport aux valeurs expérimentales disponibles. Les profils d'azote ammoniacal et de nitrates obtenus par simulation ont montré qu'à ce niveau, la calibration devrait être améliorée. De plus, comme les nitrates sont aussi impliqués dans les réactions de déphosphatation biologique, améliorer leur calibration pourrait aussi modifier la calibration effectuée au niveau du phosphore. Une calibration "optimale" devrait donc considérer le phosphore et les nitrates.

Un ensemble très limité de données a été utilisé afin de calibrer le modèle, au risque d'accorder un poids trop important à certains facteurs, et à inclure des termes quasi

empiriques dans le modèle. Afin de conforter les hypothèses proposées pour justifier les changements effectués, il aurait été souhaitable de tester le modèle A3TX sur d'autres suivis intensifs, dans les mêmes conditions d'opération. Cependant, comme les données utilisées proviennent d'une étude antérieure, l'étude de modélisation ne put s'effectuer que sur ce nombre restreint de données. Dans le futur, la capacité prédictive du modèle A3TX aurait avantage à être testée sur d'autres effluents industriels, et aussi sur d'autres configurations hydrauliques. Il pourrait aussi être adapté selon les exigences d'application, simplifié ou alors raffiné pour tenir compte d'autres facteurs influant sur la bio-P, tels que la température. Une fois le modèle bien "rôdé", il serait intéressant de l'appliquer à des études d'optimisation réelles de procédés de déphosphatation biologique.

RÉFÉRENCES

ABU-GHARARAH Z.H. et RANDALL C.W. (1991). The effect of organic compounds on biological phosphorus removal. Wat. Sci. Tech., 23(4), 585-594.

APPELDOORN K.J. , BOOM, A. J., KORTSTEE, G.J.J. et ZEHNDER, A.J.B. (1992) Contribution of precipitated phosphates and acid-soluble polyphosphate to enhanced biological phosphorus removal. Wat. Res., 26, 937-943.

ARUN V., MINO T. et MATSUO T. (1988). Biological mechanism of acetate uptake mediated by carbohydrate consumption in excess phosphorus removal systems. Wat. Res., 22(5), 565-570.

BARKER P.S. et DOLD P.L (1997). General model for biological nutrient removal in activated sludge systems. Wat. Environ. Res., 29, 633-643.

BARNARD, J.L., STEVENS G.M. et LESLIE P.J. (1985). Design strategies for nutrient removal plant. Wat. Sci.Tech., 17, Paris, 233-242.

BRDJANOVIC D. (1998). Modeling Biological Phosphorus Removal in Activated Sludge Systems Ph.D. thesis, Department of Biochemical Engineering, Technological University of Delft, The Netherlands.

CECH J.S. et HARTMAN P. (1990) Glucose induced breakdown of enhanced biological phosphorus removal. Environ. Technol., 11, 651-656

CECH J.S. et HARTMAN P. (1993). Competition between polyphosphate and polysaccharides accumulating bacteria in enhanced biological phosphate removal systems. Wat. Res., 27 (7), 1219-1225

COMEAU Y. (1986). Biochemical model for enhanced biological phosphorus removal. Wat. Res. 20(12), 1511-1521.

COMEAU Y., RABINOWITZ B., HALL K.J. et OLDHAM W.K. (1987). Phosphate release and uptake in enhanced biological phosphorus removal from wastewater. J. Wat. Pollut. Control Fed., 59, 707-715.

COMEAU Y. (1990a). La déphosphatation biologique – Métabolisme microbien, Sci.Tech.Eau., 23(1), 47-60.

COMEAU Y. (1990b). La déphosphatation biologique – Procédés et conception. Sci.Tech.Eau., 23(2), 199-216.

COMEAU Y., LAMARRE, D., ROBERGE F., PERRIER M., DESJARDINS G., HADE C. et MAYER R. (1996). Biological nutrient removal from a phosphorus-rich pre-fermented industrial wastewater. Wat. Sci. Tech., 34(1-2), 169-177.

DESJARDINS, C. (1996), Modélisation de l'enlèvement du carbone, de l'azote et du phosphore d'un effluent agro-alimentaire traité par réacteur biologique séquentiel. Mémoire de maîtrise, Ecole Polytechnique de Montréal, Québec, Canada

DOLD P.L. (1990). Incorporation of biological excess phosphorus removal in a general activated sludge model. Presented at 13th International Symposium on Wastewater, Montreal, Canada, Association québécoise des Techniques de l'Eau. November 14-16, 83-113.

DOLD P.L.(1991). Modification du modèle général des boues activées pour y inclure la déphosphatation biologique. Sci. Tech. Eau, 24(3), 229-243.

FUHS G.W. et M.CHEN (1975). Microbiological basis of phosphate removal in the activated sludge process for the treatment of wastewater. Microbial Ecol., 2, 119-138.

FUKASE T., SHIBATA M. et MIYAJI Y. (1985). The role of an anaerobic stage on biological phosphorus removal. Wat.Sci.Technol. 17, Amsterdam, 69-80.

GERBER A., MOSTERT E.S., WINTER C.T. et DE VILLIERS R.H. (1986). The effect of acetate and other short chain compounds on the kinetics of biological nutrient removal. Water S.A., 12, 7-12.

GUJER W., HENZE M., MINO T., MATSUO T., WENTZEL M.C. et MARAIS G.V.R. (1995). Activated Sludge Model no. 2. IAWQ Scientific and Technical Report No.3, International Association for Water Quality, London, U.K.

GUJER W., HENZE M., MINO T. et VAN LOOSDRECHT M.C.M. (1999). Activated Sludge Model no. 3. Wat. Sci. Tech., 39(1), 183-193.

HASCOET, M.C. et FLORENTZ M. (1985). Influence of nitrates on biological phosphorus removal from wastewater. Water SA, 11, 1-8.

HENZE M., GRADY C.P.L. JR., GUJER W., MARAIS G.V.R. et MATSUO T. (1987). Activated sludge model no.1. IAWPRC Scientific and Technical Report No.1, International Association for Water Pollution Research and Control, London, U.K.

HENZE M., GUJER W., MINO T., MATSUO T., WENTZEL M.C., MARAIS G.V.R. et VAN LOOSDRECHT M.C.M. (1999) Activated Sludge Model no.2D, ASM2D, Wat.Sci. Technol., 39(1), 165-182.

KETCHUM L., IRVINE R.L. JR., BREYFOGLE R.E. et MANNING J.F.Jr. (1989). A comparison of biological and chemical phosphorus removals in continuous and sequencing batch reactors. J.Wat.Pollut.Control.Fed., 59, 13-18.

KUBA T., VAN LOOSDRECHT M.C.M. et HEIJNEN J.J. (1996). Phosphorus and nitrogen removal with minimal COD requirement by integration of denitrifying dephosphatation and nitrification in a two-sludge system. Wat.Res., 30(6), 1702-1710.

LAROSE A. (1998) Optimisation de la cyclologie d'un procédé de déphosphatation biologique en réacteur biologique séquentiel par méthode respirométrique. Thèse de doctorat. Ecole Polytechnique de Montréal, Québec, Canada

LIU W., NAKAMURA K., MATSUO T. et MINO T. (1997). Internal energy-based competition between polyphosphate- and glycogen-accumulating bacteria in biological phosphorus removal reactors- Effect of P/C feeding ratio. Wat. Res., 31(6), 1430-1438.

MARAIS, G.V.R., LOEWNTHAL R.E. et SIEBRITZ I.P. (1983). Review observations supporting phosphate removal by biological excess uptake. Water Sci. Technol., 15(3/4), 15-41.

MAURER M., ABRAMOVICH D., SIEGRIST H. et GUJER W. (1999). Kinetics of biologically induced phosphorus precipitation in waste-water treatment. Wat. Res., 33(2), 484-493.

MEINHOLD J., PEDERSEN H., ARNOLD E., ISAACS S. et HENZE M. (1998). Effect of continuous addition of an organic substrate to the anoxic phase on BPR. IAWQ 19th international conference, Vancouver, June 21-26th, 96-103

MINO T., ARUN V., TSUZUKI Y. et MATSUO T. (1985). Effect of phosphorus accumulation on acetate metabolism in the biological phosphorus removal process. Dans: Advances in Water Pollution Control: Biological Phosphate Removal from Wastewaters (Edited by Ramadori R.), Pergamon Press, Oxford, 27-38.

MURNLEITNER E., KUBA T., VAN LOOSDRECHT M.C.M. et HEIJNEN J.J. (1997). An integrated metabolic model for the aerobic and denitrifying biological phosphorus removal. Biotechnol. Bioeng., 54(5), 434-450.

OLDHAM W.K. (1985). Full scale optimization of biological phosphorus removal at Kelowna, Canada. Wat.Sci.Technol., 17, Paris, 243-257.

RANDALL, C.W., BARNARD J.L. et STENSEL H.D. (éds.) (1992). Design and retrofit of wastewater treatment plants for biological nutrient removal. Technomic Publ. Co., Lancaster, PA.

RAYMOND L., COMEAU Y., RIEL J.F. et BRIÈRE F.G. (1991). Evaluation of the feasibility of implementing biological phosphorus removal in wastewater treatment plants. Water Poll. Res. J. Canada, 26(4), 475-494.

RICKARD L.F. et MCCLINTOCK S.A. (1992). Potassium and magnesium requirements for enhanced biological phosphorus removal from wastewater. Wat. Sci. Tech., 26(9-11), 2203-2206.

SATOH, H., MINO T. et MATSUO T. (1992). Uptake of organic substrates and accumulation of polyhydroxyalkanoates linked with glycolysis of intracellular carbohydrates under anaerobic conditions in the biological excess phosphate removal processes. Wat. Sci. Tech., 26(5-6), 933-942.

SMOLDERS, G. J. F., VAN DER MEIJ J., VAN LOOSDRECHT M.C.M. et HEIJNEN J.J. (1994a). Model of the anaerobic metabolism of the biological phosphorus removal process - Stoichiometry and pH influence. Biotechnol. Bioeng., 43, 461-470.

SMOLDERS, G. J. F., VAN DER MEIJ J., VAN LOOSDRECHT M.C.M. et HEIJNEN J.J. (1994b). Stoichiometric model of the aerobic metabolism of the biological phosphorus removal process. Biotechnol. Bioeng., 44, 837-848.

SMOLDERS, G. J. F., VAN DER MEIJ J., VAN LOOSDRECHT M.C.M. et HEIJNEN J.J. (1995). A structured metabolic model for anaerobic and aerobic stoichiometry and kinetics of the biological phosphorus removal process. Biotechnol. Bioeng., 47, 227-287.

VAN LOOSDRECHT M.C.M. et HENZE M. (1999). Maintenance, endogenous respiration, lysis, decay and predation. Wat. Sci. Tech., 39(1), 107-117.

WENTZEL M.C., EKAMA G.A. et MARAIS G.V.R. (1989a). Enhanced polyphosphate organism cultures in activated sludge systems - Part II: Experimental behaviour. Water SA, 15, 71-88.

WENTZEL M.C., EKAMA G.A. et MARAIS G.V.R. (1989b). Enhanced polyphosphate organism cultures in activated sludge systems - Part III: Kinetic model. Water SA, 15, 89-102.

WILD D. ET SIEGRIST H. (1999). The simulation of nutrient fluxes in wastewater treatment plants with EBPR. Wat. Res., 33(7), 1652-1662.

ANNEXE I

Cette annexe contient une description du Model Developer appliqué au modèle A3TX.

Ci-joint une disquette contenant le fichier Excel (fichier "A3TX") correspondant.

- **Le feuillet "Model" contient la matrice Peterson du modèle intégré dans un fichier Excel où des macros écrites en Visual Basic sont activées (zone grisée). Les fonctions de saturation et d'inhibition y sont également définies (annexe A.1.1)**
- **Le feuillet "Composite" contient les définitions des variables composées (ex: MES, DCO) (annexe A.1.2)**
- **Le feuillet "Model variables" contient les variables ainsi que les paramètres stœchiométriques et cinétiques du modèle. (annexe A.1.3)**
- **Le feuillet "GPS-X variables" contient une liste des variables de GPS-X. (annexe A.1.4)**
- **Le feuillet "How to" fournit une description sommaire du Model Developer (annexe A.1.5).**
- **Le feuillet "Model Info" présente les références relatives aux paramètres utilisés dans le modèle (annexe A.1.6)**
- **Le feuillet "Naming conventions" donne les règles de nomenclature des variables et paramètres pour utilisation dans GPS-X. (annexe A.1.7)**
- **Le feuillet "Remarques" contient quelques remarques concernant la version du Model Developer telle que présentée ici. (annexe A.1.8)**

A.1.1 Description du modèle A3TX

A.1.1.1 Matrice du modèle

Réactions 1 à 9:

Model:

GPS-X library:

		I: 1 2 3 4 5 6 7 8 9									
		Stoichiometry matrix:									
J-Matlab	J	Rates	so2	sa	sf	sl	spe4	snh4	sno3	sn2	smg
		Units:	g COD	g COD	g COD	g COD	g P	g N	g N	g N	g Mg
1	1	rlysGEN			1-faslysGEN	faslysGEN	c1,P	c1,N			0.157*c1,P
2a	2	nsassto2HET	c2,COD	-1							
3a	3	nsasstoaxHET		-1					c3,COD	-c3,COD	
2	4	nsassto2HET	c4,COD		-1		c4,P	c4,N			0.157*c4,P
3	5	nsasstoaxHET			-1		c5,P	c5,N	c5,COD	-c5,COD	0.157*c5,P
4	6	nsassto2HET	c6,COD				c6,P	c6,N			0.157*c6,P
5	7	nsasstoaxHET					c7,P	c7,N	c7,COD	-c7,COD	0.157*c7,P
6	8	nsassto2HET	c8,COD				c8,P	c8,N			0.157*c8,P
7	9	nsasstoaxHET					c9,P	c9,N	c9,COD	-c9,COD	0.157*c9,P
8	10	nsassto2HET	c10,COD								
9	11	nsasstoaxHET							c11,COD	-c11,COD	
8a	12	rferHET		1	-1		c12,P	c12,N			0.157*c12,P
10	13	rgro2NIT	c13,COD				c13,P	c13,N	1/NIT		0.157*c13,P
11	14	rgro2NIT	c14,COD				c14,P	c14,N			0.157*c14,P
12	15	rgro2NIT					c15,P	c15,N	c15,COD	-c15,COD	0.157*c15,P
13	16	ngphastoanPAO		-1			yxppphaPAO				0.157*yxppphaPAO
14	17	ngphastoinPAO					c17,P				0.157
15	18	ngphasto2PAO	c18,COD				c18,P	c18,N			0.157*c18,P
16	19	ngphasto2PAO	c19,COD				c19,P	c19,N			0.157*(-1*(1/nyppo2PAO)*TpbmGEN)
17	20	ngphasto2PAO	c20,COD				c20,P	c20,N			0.157*c20,P
18	21	ngphasto2PAO	c21,COD				c21,P	c21,N			0.157*c21,P
19	22	ngphasto2PAO					c22,P	c22,N	c22,COD	-c22,COD	0.157*c22,P
20	23	ngphasto2PAO					c23,P	c23,N	c23,COD	-c23,COD	0.157*(-1*(1/nyppo2PAO)*TpbmGEN)
21	24	ngphasto2PAO					c24,P	c24,N	c24,COD	-c24,COD	0.157*c24,P
22	25	ngphasto2PAO					c25,P	c25,N	c25,COD	-c25,COD	0.157*c25,P
23	26	ngphasto2PAO					-1				-0.157
24	27	ngphasto2PAO					1				0.157
25	28	ngphasto2PAO									
26	29	ngphasto2PAO					-1				-0.157
27	30	ngphasto2PAO					1				0.157

Conservation matrix:

	COD	-1	1	1	1			-2.86			COD
N				fnsiGEN	fnsiGEN		1	1	1		Nitrogen
P				fpsiGEN	fpsiGEN	1					Phosphorus
CH		-1/64				-1.5/31	1./14	-1./14		2/24.3	Alkalinity (charge)

A.1.1.1 (suite) Matrice du modèle

Reactions 20 à 24:

j-Method	i:	Stoichiometry matrix:				
		Metes	Unites:	g COO	g COO	g TSS
1	20	xREP				g TSS
2	21	xREP				g TSS
3	22	xREP				g TSS
4	23	xREP				g TSS
5	24	xREP				g TSS
6	25	xREP				g TSS
7	26	xREP				g TSS
8	27	xREP				g TSS
9	28	xREP				g TSS
10	29	xREP				g TSS
11	30	xREP				g TSS
12	31	xREP				g TSS
13	32	xREP				g TSS
14	33	xREP				g TSS
15	34	xREP				g TSS
16	35	xREP				g TSS
17	36	xREP				g TSS
18	37	xREP				g TSS
19	38	xREP				g TSS
20	39	xREP				g TSS
21	40	xREP				g TSS
22	41	xREP				g TSS
23	42	xREP				g TSS
24	43	xREP				g TSS
25	44	xREP				g TSS
26	45	xREP				g TSS
27	46	xREP				g TSS
28	47	xREP				g TSS
29	48	xREP				g TSS
30	49	xREP				g TSS

Conversion matrix:				
COD	1			
N	1/16.78			
P	1/5.41			
CH				
Nitrogen				
Phosphorus				
Alkalinity				
(charge)				

NOTES:

NH4 and PO4 needs, alkalinity and TSS changes need to be added to the growth processes of heterotrophs, an aspect not fully described in ASM2d (other than in the "example stoichiometry matrix" with numerical values)

Some coefficients under no_2 , no_3 , no_4 , no_5 , no_6 and alk can be needed to be defined to the following extent:

- "no2" can be either an electron acceptor (for denitrification) or a product of nitrification. In the first case, it is calculated from COD conversion and in the latter case, it must be defined as "1/A"

- It is advisable to compare the values obtained with those provided in the sheet "Stoic coef" of this spreadsheet to ensure that the coefficients were properly specified.

The TSS does not have to be in this matrix as it is calculated as a composite variable.

To add processes, the extra lines should be added immediately below the lines in this matrix.

Notes for conversion matrix

$\text{CO}_2 = (\text{sum}(\text{no}_i) \cdot \text{COD}_i) - (\text{COD}_1) - (\text{COD}_2) / \text{COD}_2$

Fractions must have a decimal point for floating point accuracy in calculations

A.1.2 Variables composites du modèle

Composite Variables vector for GPS-X:
Organic Matter (COD, BOD, TSS)

sco	sa + sf + sl
xco	xl + xs + xpha + xhet + xpa0 + xnit
cod	xco + sco
sbod20	fbod20sco * (sco - sl)
xbod20	fbod20xco * xco
bod20	sbod20 + xbod20
sbo	sbod20 * EXP(- k _{sbod} * t)
bo	xbod20 * EXP(- k _{xbod} * t)
bod	sbo + bo
xv	xco / fcod
xnv	xnv + xfeoh + xfe + xnapo4 + xndpo4
xn	xv + xnv
Nitrogen	
sln	snh4 + sl * fnsigen + sl * fnsigen
xln	xl * fnsigen + xs * fnsigen + (xhet + xpa0 + xnit) * fbnmgen
ltn	xln + sln
ln	ltn + sn3
Phosphorus	
xp	xs * fpxsigen + xl * fpxigen + (xhet + xpa0 + xnit) * fpbmgen + xpp + xndpo4/5.78 + xnapo4/5.41 + xfe0.205
slp	spo4 + sl * fpaigen + sl * fpaigen
tp	xp + slp

Note that BOD values are estimated by considering that they are 95 % of the COD
and that BOD values are estimated by a first-order rate equation

ss	sa + sl
----	---------

A.1.3 Variables du modèle

A.1.3.1 Composés

List of variables (listed in alphabetical order of GPS-X name within each section and sub-section)

ASM3-TUD GPS-X

Typical Value

Units

Reference

List of variables:		Initial value in act. sludge		Mapping:	
COMPONENTS					
S _{O2}	so2	Dissolved oxygen (negative COD)	2	g COD / m ³	totalib
S _A	sa	Soluble fermented organic material (ex. volatile fatty acids)	5	g COD / m ³	so2
S _F	sf	Soluble fermentable, readily biodegradable organic material	10	g COD / m ³	sa
S _I	si	Soluble inert organic material	10	g COD / m ³	sf
S _{PO4}	spo4	Inorganic soluble phosphorus, primarily orthophosphorus	10	g P / m ³	si
S _{NH4}	snh4	NH ₄ + NH ₃ nitrogen	5	g N / m ³	spo4
S _{NO3}	sno3	Nitrate and nitrite	5	g N / m ³	snh4
S _{N2}	sn2	Dinitrogen (N ₂)	20	g N / m ³	sno3
	smg	Magnesium ions	10	g Mg / m ³	sn2
	sca	Calcium ions	60	g Ca / m ³	smg
S _{ALK}	salk	Alkalinity	12	mole HCO ₃ ⁻ / m ³	sca
X _S	xs	Slowly biodegradable substrate	40	g COD / m ³	salk
X _I	xi	Inert particulate organic material	200	g COD / m ³	xs
X _{STO}	xsto	Storage compounds of the heterotrophic biomass	200	gCOD/m ³	xi
X _H	xHET	Heterotrophic biomass	5000	g COD / m ³	xsto
X _{PHA}	xpha	Poly-beta-hydroxyalkanoates (PHA) of PAO	150	g COD / m ³	xHET
X _{PP}	xpp	Polyphosphates of PAO	250	g P / m ³	xpha
	xgly	Glycogen of PAO	250	g COD / m ³	xpp
X _{PAO}	xPAO	Phosphate accumulating organisms: PAO	1600	g COD / m ³	xgly
X _{AUT}	xNIT	Autotrophic nitrifying organisms	75	g COD / m ³	xPAO
X _{HDP}	xhdpo4	Hydroxydicalcium phosphate, an intermediate surface complex	20	g TSS / m ³	xNIT
X _{HAP}	xhapo4	Hydroxyapatite, a final phosphate precipitate	200	g TSS / m ³	xhdpo4
	xfeoh	Iron hydroxide	50	gTSS/m ³	xhapo4
	xFEP	Iron phosphate	300	gTSS/m ³	xfesh
					xFEP

A.1.3.2 Variables composites

COMPOSITE VARIABLES		
Organic Matter (COD, BOD, TSS)		
sbod	soluble carbonaceous BOD ₅	g/m ³
xbod5	particulate carbonaceous BOD ₅	g/m ³
bod5	total carbonaceous BOD ₅	g/m ³
sbod20	soluble carbonaceous BOD ₂₀	g/m ³
xbod20	particulate carbonaceous BOD ₂₀	g/m ³
bod20	total carbonaceous BOD ₂₀	g/m ³
ss	soluble biodegradable COD (substrate)	g/m ³
scod	soluble COD	g/m ³
pcod	particulate COD	g/m ³
cod	total COD	g/m ³
xvss	volatile suspended solids	g/m ³
xvss	suspended solids	g TSS / m ³
Nitrogen		
stn	soluble TKN	g/m ³
xtkn	particulate TKN	g/m ³
tkn	total Kjeldahl nitrogen (TKN)	g/m ³
ln	total N	g/m ³
Phosphorus		
stp	soluble TP	g/m ³
xtp	particulate TP	g/m ³
tp	total phosphorus (TP)	g/m ³
PAOs		
phpaod	PHA content of active biomass xPAO	
lppPAO	Poly-P content of active biomass xPAO	
lpgPAO	Glycogen content of active biomass xPAO	
Precipitation of P		
phCAP	Correction coefficient for the activity of ions for calcium phosphate precipitation	
pH	pH	
Stoichiometric coefficients for composite variables (ATTENTION: for biomass, not wastewater)		
fbodcod	CBOD ₅ to CBOD ₂₀ ratio - INF	g/g
-	Sol. carbonac. BOD ₂₀ / carbonac. BOD ₅ (sbod20 / bod20)	g/g
Y ₁	VSS/TSS ratio - INF	g/g
Y ₂	Particulate COD to VSS ratio - INF	g/g
Y ₃	NH ₄ / TKN (snh4 / tkn)	g/g
fbodcod	carbonac. BOD / COD (bod / cod)	g/g
Y ₄	slowly biodegrad. organic matter / particul. COD (xs / xcod)	g/g
Y ₅	biomass COD / particul. COD (xb / xcod)	g/g
Y ₆	inert soluble matter / soluble COD (si / scod)	g/g
Y ₇	first-order rate (base e) for soluble carbonac. BOD (Metcalf & Eddy, 1991)	g/g
Y ₈	first-order rate (base e) for particulate carbonac. BOD	g

Xvss

A.1.3.3 Paramètres stoechiométriques et cinétiques

Paramètres généraux

STOICHIOMETRIC AND KINETIC PARAMETERS		at 10°C	at 20°C (or default)	
General: Heterotrophs, PAOs and Autotrophic nitrifiers				
Stoichiometric & Kinetic - Composite variables (GEN)				
lcov	foodvss con	Particulate COD to VSS ratio - GEN, a constant value for the reactor and its effluent as long as the reactor is not empty	1.48	g COD/g VSS
	fbod5bod20	Total CBOD ₅ to total CBOD ₂₀ ratio - GEN	0.66	g BOD/g BOD
	fsbod20scod	Soluble CBOD ₂₀ / soluble COD ratio - GEN	0.95	g BOD/g COD
	frbod20xcod	Particulate CBOD ₂₀ / particulate COD ratio - GEN	0.95	g BOD/g COD
	ksbod	Soluble CBOD rate constant (base e) - GEN	0.30	d ⁻¹
	krbod	Particulate CBOD rate constant (base e) - GEN	0.20	d ⁻¹
Stoichiometric - General (GEN)				
lnam	fnbmGEN	N content of active biomass - GEN	0.07	g N / g COD
lnsf	fnstGEN	N content of fermentable substrate S _F - GEN	0.03	g N / g COD
lnsi	fnstGEN	N content of inert soluble COD S _I - GEN	0.01	g N / g COD
lnpi	fnstGEN	N content of inert particulate COD - GEN	0.02	g N / g COD
lnx	fnxsGEN	N content of slowly biodegradable substrate X _S - GEN	0.04	g N / g COD
lpam	fpbmGEN	P content of active biomass - GEN	0.02	g P / g COD
lpstf	fpstGEN	P content of fermentable substrate S _F - GEN	0.01	g P / g COD
lpst	fpstGEN	P content of inert soluble COD S _I - GEN	0.00	g P / g COD
lpst	fpstGEN	P content of inert particulate COD - GEN	0.01	g P / g COD
lpst	fpstGEN	P content of slowly biodegradable substrate X _S - GEN	0.01	g P / g COD
fai	fxstGEN	Fraction of soluble inert COD (S _I) resulting from the lysis of X _S - GEN	0.00	g COD / g COD
Kinetic - General (GEN)				
kh	krlhsGEN	Max specific rate for hydrolysis of the particulate substrate - GEN	2.00	d ⁻¹
K _N	kslhtGEN	Satur. coeff. for hydrolysis of particulate COD - GEN	1.00	g COD / g COD
	MonolhsGEN	Monod satur. function for X _S / X _{MEY} for hydrolysis - GEN		

A.1.3.3 Paramètres stoechiométriques et cinétiques (suite)

Hétérotrophes

<i>Hétérotrophes</i>			
<i>Stoichiometric - Heterotrophs (MET)</i>			
f_{bi}	fraction of inert (endog.) COD generated by het. active biomass lysis	0.10	$g\ COD / g\ COD$
Y_{bi}	Yield coeff. for aerobic growth of heterot. on xsto	0.63	$g\ COD / g\ COD$
Y_{sto}	Yield coeff. for aerobic storage of ss as xsto (heterotrophs)	0.80	$gCOD/gCOD$
Y_{het}	Yield coeff. for aerobic storage of ss as xsto (heterotrophs)	0.80	$gCOD/gCOD$
<i>Kinetic - Heterotrophs (MET)</i>			
f_{di}	Fraction of partic. inert COD (xi) resulting from the endo. resp. of xHET	0.28	
k_{rxsto}	Rate constant for ss storage by heterotrophs	2.50	$g\ COD/g\ COD/d$
k_{rxsto}	Rate constant for ss storage by heterotrophs	2.50	$g\ COD/g\ COD/d$
μ_{HET}	Max growth rate of heterot. on xsto	1.00	$g\ COD/g\ COD/d$
q_{bi}	Max specific rate of fermentation by heterot.	1.50	d'
r_{degroa}	Reduction factor for growth of heterot. by denitrification	0.80	-
r_{degroa}	Reduction factor for anoxic storage of st and ss to xsto by heterotrophs	0.8	
$bozHET$	Aerobic endogenous respiration rate of the heterotrophs	0.1	$gCOD/gCOD/d$
$baeHET$	Aerobic endogenous respiration rate of the heterotrophs	0.05	$gCOD/gCOD/d$
$bxsto2HET$	Aerobic endogenous respiration rate of Xsto by the heterotrophs	0.2	$gCOD/gCOD/d$
$bxstoaxHET$	Anoxic endogenous respiration rate of Xsto by the heterotrophs	0.05	$gCOD/gCOD/d$
$ks2HET$	Satur. / inhib. coeff. for O_2 for heter. (electron acceptor)	0.20	$g\ O_2 / m^3$
$Ms2HET$	Monod satur. function for O_2 for heterot.		
$Ia2HET$	Inhibition function by O_2 for heterot.		
$kaHET$	Satur. coeff. For storage of S_A by heterotrophs	2.00	$g\ COD / m^3$
$kaHET$	Satur. coeff. For storage of S_P by heterotrophs	2.00	$g\ COD / m^3$
$MaHET$	Monod satur. function for S_A for heterot.		
$MaHET$	Monod satur. function for S_P for heterot.		
$SaHET$	Satur. coeff. for fermentation of S_P	20.00	$g\ COD / m^3$
$MaHET$	Monod satur. function for S_P for fermentation for heterot.		
$kanHmuHET$	Satur. coeff. for NH_4 as nutrient for heterot.	0.01	$g\ N / m^3$
$kapoHmuHET$	Satur. coeff. for PO_4 as nutrient for heterot.	0.01	$g\ P / m^3$
$ManHmuHET$	Monod satur. function for NH_4 as nutrient for heterot.		
$kan3HET$	Satur. / inhib. coeff. for nitrate (to N_2) for heterot.	0.50	$g\ N / m^3$
$Man3HET$	Monod satur. function for NO_3 for heterot.		
$Ia3HET$	Inhibition function by NO_3 for heterot.		
$kaalkHET$	Satur. coeff. for ALK for heterot.	0.10	$mole\ HCO_3^- / m^3$
$MaalkHET$	Monod satur. function for ALK for heterot.		
$ksxstoHET$	Saturation constant for xsto by heterotrophs	1.00	$g\ COD / g\ COD$
$MxstoHET$	Monod satur. function for xsto/xHET for growth on xsto (heterot.)	1.00	

A.1.3.3 Paramètres stoechiométriques et cinétiques (suite)

Bactéries diétophosphatées

STOICHIOMETRIC AND KINETIC PARAMETERS			at 18°C	at 20°C	
Phosphorus accumulating organisms					
Stoichiometric - Phosphorus accumulating organisms (PAOs)					
	gPaO	Nitrate sensitivity factor for poly-P formation		0.10	-
K_{max}	gppasPAO	Max ratio of X_{pp} / X_{pa} in PAO	0.38	0.38	g P / g COD
f_d	ydyPAO	Yield of particulate inert COD generated by PAO biomass lysis		0.10	g COD / g COD
Y_{phs}	yphsPAO	PHA stored per acetate consumed		1.50	g COD / g COD
Y_{phs2}	yphs2PAO	Aerobic yield coeff. for PHA (PHA consumed/biomass formed)		1.44	g COD / g COD
Y_{phs2a}	yphs2aPAO	Anoxic yield coeff. for PHA (PHA consumed/biomass formed)		1.76	g COD / g COD
Y_{PPO}	yppPAO	PP requirement (PQ ₂ release) per PHA stored by PAO		0.38	g P / g COD
Y_{PPO2}	ypp2PAO	Aerobic yield coeff. for poly-P (poly-P formed / biomass formed)		4.48	g P / g COD
Y_{PPO2a}	ypp2aPAO	Anoxic yield coeff. for poly-P (poly-P formed / biomass formed)		2.61	g P / g COD
Y_{ghs}	yghsPAO	Glycogen consumed per acetate stored as PHA		0.50	g COD / g COD
Y_{ghs2}	yghs2PAO	Aerobic yield coeff. for glycogen (glycogen formed/biomass formed)		1.27	g COD / g COD
Y_{ghs2a}	yghs2aPAO	Anoxic yield coeff. for glycogen (glycogen formed/biomass formed)		1.59	g COD / g COD
Kinetic - Phosphorus accumulating organisms (PAOs)					
m_{pp}	bppPAO	Rate of poly-P degradation for anaerobic maintenance		0.06	g P / g COD/d
m_{pa2}	bpa2PAO	Rate of biomass (xPAO) consumption for aerobic maintenance		0.07	g COD / g COD/d
m_{a2}	bpa2PAO	Rate of O ₂ consumption for aerobic maintenance		0.06	g COD / g COD/d
m_{pa2a}	bpa2aPAO	Rate of biomass (xPAO) consumption for anoxic maintenance		0.06	g COD / g COD/d
m_{a2a}	bpa2aPAO	Rate of O ₂ consumption for anoxic maintenance		0.02	g N / g COD/d
q_{max}	lmaxPAO	Maximum rate of VFA storage by PAO		9.67	g COD / g COD/d
q_{PHA}	lphsPAO	PHA consumption rate		7.55	g COD / g COD/d
q_{PP}	lppPAO	Poly-P synthesis rate		0.45	g P / g COD/d
q_{GLY}	lghsPAO	Glycogen formation rate		0.15	g COD / g COD/d
n_{a2}	etpa2PAO	Reduction factor for anoxic activity of PAO		0.90	-
K_{O2}	lpa2PAO	Satur. / inhib. coeff. for O ₂ (el. accept.) for PAO	0.20	0.20	g O ₂ / m ³
	lpa2PAO	Monod satur. function for O ₂ (el. accept.) for PAO			
	lpa2PAO	Inhib. function for O ₂ (el. accept.) for PAO			
K_s	lpaPAO	Satur. coeff. for S _a for PHA storage by PAO	4.00	4.00	g COD / m ³
	lpaPAO	Monod satur. function for S _a for PHA storage by PAO			
K_{PS}	lappPAO	Satur. coeff. for P for storage of poly-P by PAO	3.10	3.10	g P / m ³
	lappPAO	Monod function for P in storage of PP by PAO			
K_P	lappPAO	Satur. coeff. for P as nutrient for PAO	0.20	0.20	g P / m ³
	lappPAO	Monod satur. function for P as nutrient for PAO			
K_{NH4}	laniPAO	Satur. coeff. for NH ₄ as nutrient for PAO	0.05	0.05	g N / m ³
	laniPAO	Monod satur. function for NH ₄ as nutrient for PAO			
K_{NO3}	lano3PAO	Satur. coeff. for NO ₃ (el. accept.) for PAO		1.40	g N / m ³
	lano3PAO	Monod satur. function for NO ₃ (el. accept.) for PAO			
	lmgPAO	Satur. coeff. for magnesium for PAO		5	g Mg / m ³
	lmgPAO	Monod satur. function for magnesium for PAO			
K_{ALK}	lalkPAO	Satur. coeff. for alkalinity for PAO	0.10	0.10	mole HCO ₃ / m ³
	lalkPAO	Monod satur. function for alkalinity for PAO			
K_{PHA}	lphsPAO	Satur. coeff. for PHA for PAO	0.01	0.01	g COD / m ³
	lphsPAO	Monod satur. function for PHA for PAO			
K_{PP}	lppPAO	Satur. coeff. for poly-P storage by PAO	0.01	0.01	g P / m ³
	lppPAO	Monod saturation function for poly-P storage by PAO			
K_{PP}	lppPAO	Inhibition coeff. for PP storage	0.02	0.02	g COD / g COD
	lppPAO	Inhibition function for PP storage			
K_{GLY}	lghsPAO	Satur. coeff. for glycogen in storage of PHA by PAO	0.01	0.01	g COD / m ³
	lghsPAO	Monod function for glycogen in storage of PHA by PAO			

Bactéries nitrifiantes

Nitrifiers					
Stoichiometric - Nitrifiers (NIT)					
Y_A	yNIT	Yield coeff. for nitrifiers per NH ₄ used		0.24	g COD / g N
f_d	blyNIT	Fraction of inert COD (endog. residue) generated by nitrifiers lysis		0.10	g COD / g COD
Kinetic - Nitrifiers (NIT)					
m_{NIT}	muNIT	Maximum specific rate of nitrification	0.35	1.00	d ⁻¹
q_{a2}	ba2NIT	Rate of aerobic endogenous respiration for xNIT	0.05	0.15	g COD / g COD/d
q_{a2a}	ba2aNIT	Rate of anoxic endogenous respiration for xNIT	0.02	0.05	g COD / g COD/d
K_{O2}	lao2NIT	Satur. coeff. for O ₂ (el. accept.) for nitrifiers	0.50	0.50	g O ₂ / m ³
	lao2NIT	Saturation function for O ₂ for nitrifiers			
K_{NO3}	lano3NIT	Satur. coeff. for NO ₃ (el. accept.) for nitrifiers	0.50	0.50	g N / m ³
	lano3NIT	Satur. function for NO ₃ (el. accept.) for nitrifiers			
	lpo4NIT	Satur. coeff. for PO ₄ as substrate for nitrifiers	1.00	1.00	g P / m ³
K_{NH4}	laniNIT	Satur. coeff. for NH ₄ as substrate for nitrifiers	1.00	1.00	g N / m ³
	laniNIT	Saturation function for NH ₄ as substrate for nitrifiers			
K_{ALK}	lalkNIT	Satur. coeff. for ALK for nitrifiers	0.50	0.50	mole HCO ₃ / m ³
	lalkNIT	Saturation function for alkalinity for nitrifiers			

A1.3.3 Paramètres stoechiométriques et cinétiques (suite)

Précipitation du phosphore avec des métaux

Precipitation of phosphate with metals					
Kinetics - Phosphorus Precipitation PPRE					
Calcium phosphate precipitation					
KHOP KHAP KHOP1 KHOP2	shpso4CAP	Maximum rate constant for hydroxylapatite phosphate formation or redissolution	0.45	0.29	gCa/m ³ /d
	shpso4CAP	Rate constant for hydroxylapatite formation	31.50	15.50	g P / m ³ / d
	shpso41CAP	Saturation coefficient for the precipitation of shpso4	0.03	0.03	gP/gTSS
	shpso42CAP	Saturation coefficient for the dissolution of shpso4 and precipitation of shpso4	0.000030	0.000030	gP/gTSS
	shpso411CAP	Inhibition function for the precipitation of shpso4			
	shpso42CAP	Saturation function for the dissolution of shpso4 and precipitation of shpso4			
	shso4CAP	Stoich. coeff. for ALK for shpso4	0.10	0.10	mole HCO ₃ ⁻ / m ³
	shso4CAP	Saturation function for albedo for shpso4			
	shpso4CAP	Solubility product of HOP	1.09E-22	2.51E-23	gP gCa/m ³ /d
	h1CAP	Activity coefficient for monovalent ions; value at ionic strength I = 0.01	0.9	0.9	-
	h2CAP	Activity coefficient for divalent ions; value at ionic strength I = 0.01	0.68	0.68	-
	pH2con	pH under aerobic conditions		7.7	pH units
pHcon	pH under anaerobic conditions		7.0	pH units	
iso2phCAP	Saturation coefficient to calculate the pH according to the oxygen concentration		0.1	g O ₂ / m ³	
iso2phCAP	Saturation coefficient to calculate the pH according to the oxygen concentration				
Iron phosphate precipitation					
KPRE KRED	irpso4FEP	Rate constant for iron-phosphate precipitation	1.0	1.0	m ³ (gFe(OH) ₃)/d
	irpso4FEP	Rate constant for iron-phosphate redissolution	0.6	0.6	d ⁻¹
	irso4FEP	Saturation coefficient of albedo for iron-phosphate redissolution	0.5	0.5	mole HCO ₃ ⁻ / m ³
	irso4FEP	Saturation function of albedo for iron-phosphate redissolution			

Temperature coefficient variables

Where appropriate for some kinetic parameters, an Arrhenius temperature variable name is created which is named "arr{var. name}"

For example, "arrmuHET" is the Arrhenius temperature coefficient for muH, the max growth rate of heterotrophs

The Arrhenius constant is calculated by: $Arr = (k_1 / k_2) \cdot (1 / (T_1 - T_2))$

The reaction rate is corrected by multiplying by the following factor: $Arr \cdot (T - 20)$.

The temperature range for applying the Arrhenius temperature coefficient should be bounded between a min and a max value.

A.1.4 Variables de GPS-X

A.1.4.1 Librairie CNLIB

GPS-X 2.4 library: state variable listing

cnlib:		
	soluble inert organics	gCOD/m3
	readily biodegradable (soluble) substrate	gCOD/m3
	particulate inert organics	gCOD/m3
	slowly biodegr. (stored, particulate) substrate	gCOD/m3
	active heterotrophic biomass	gCOD/m3
	active autotrophic biomass	gCOD/m3
	unbiodegradable particulates from cell decay	gCOD/m3
	cell internal storage product	gCOD/m3
	dissolved oxygen	gO2/m3
	nitrate and nitrite N	gNm3
	free and ionized ammonia	gNm3
	soluble biodegradable organic nitrogen (in ss)	gNm3
	particulate biodegr. organic nitrogen (in ss)	gNm3
	dinitrogen	gNm3
	alkalinity	mole/m3

composite variable listing

composite variables:		
	filtered (soluble) carbonaceous BOD5	gO2/m3
	particulate carbonaceous BOD5	gO2/m3
	carbonaceous BOD5	gO2/m3
	filtered (soluble) carbonaceous BOD20	gO2/m3
	particulate carbonaceous BOD20	gO2/m3
	carbonaceous BOD20	gO2/m3
	filtered COD	gCOD/m3
	COD of the suspended solids	gCOD/m3
	chemical oxygen demand	gCOD/m3
	filtered TKH	gNm3
	total Kjeldahl nitrogen	gNm3
	total nitrogen	gNm3
	inert inorganic suspended solids	gm3
	volatile suspended solids	gm3
	suspended solids	gm3

A.1.4.2 Librairie CNFLIB

cnlib:		
	soluble inert organics	gCOD/m3
	readily biodegradable (soluble) substrate	gCOD/m3
	particulate inert organics	gCOD/m3
	slowly biodegr. (stored, particulate) substrate	gCOD/m3
	active heterotrophic biomass	gCOD/m3
	active autotrophic biomass	gCOD/m3
	unbiodegradable particulates from cell decay	gCOD/m3
	dissolved oxygen	gO2/m3
	nitrate and nitrite N	gNm3
	free and ionized ammonia	gNm3
	soluble biodegradable organic nitrogen (in ss)	gNm3
	particulate biodegr. organic nitrogen (in ss)	gNm3
	polyphosphate accumulating biomass	gCOD/m3
	poly-hydroxy-alkanoates (PHA)	gCOD/m3
	stored polyphosphate	gP/m3
	volatile fatty acids	gCOD/m3
	soluble phosphorus	gP/m3
	alkalinity	mole/m3
	dinitrogen	gNm3
	soluble unbiodegradable organic nitrogen (in ss)	gNm3
	fermentable readily biodegradable substrate	gCOD/m3
	stored glycogen	gCOD/m3
	stored polyphosphate (releasable)	gP/m3
	metal-hydroxides	gm3
	metal-phosphate	gm3

A.1.4.3 Librairie CN2LIB

cnlib:		
	particulate inert inorganic material	gTSS/m3
	soluble inert organics	gCOD/m3
	particulate inert organics	gCOD/m3
	unbiodegradable particulates from cell decay	gCOD/m3
	readily biodegradable substrate	gCOD/m3
	rapidly hydrolyzable substrate	gCOD/m3
	slowly hydrolyzable substrate	gCOD/m3
	active heterotrophic biomass	gCOD/m3
	active Nitrosomonas biomass	gCOD/m3
	active nitrite oxidizer biomass	gCOD/m3
	dissolved oxygen	gO2/m3
	nitrite N	gNm3
	nitrate N	gNm3
	soluble inert organic nitrogen (in ss)	gNm3
	particulate inert organic nitrogen (in ss)	gNm3
	free and ionized ammonia	gNm3
	soluble biodegradable organic nitrogen (in ss)	gNm3
	particulate biodegr. organic nitrogen (in ss)	gNm3
	alkalinity	mole/m3

A.1.4 Variables de GPS-X (suite)

A.1.4.4 Librairie IFLIB

iflib:		
	soluble inert organics	gCOD/m3
	readily biodegradable (soluble) substrate	gCOD/m3
	particulate inert organics	gCOD/m3
	slowly biodegr. (stored, particulate) substrate	gCOD/m3
	active heterotrophic biomass	gCOD/m3
	active autotrophic biomass	gCOD/m3
	unbiodegradable particulates from cell decay	gCOD/m3
	dissolved oxygen	gO2/m3
	nitrate and nitrite N	gNm3
	free and ionized ammonia	gNm3
	soluble biodegradable organic nitrogen (in ss)	gNm3
	particulate biodegr. organic nitrogen (in ss)	gNm3
	soluble component "a"	notset
	soluble component "b"	notset
	soluble component "c"	notset
	soluble component "d"	notset
	soluble component "e"	notset
	soluble component "f"	notset
	soluble component "g"	notset
	soluble component "h"	notset
	particulate component "a"	gCOD/m3
	particulate component "b"	gCOD/m3

A.1.4.5 Librairie CN2IFLIB

cn2iflib:		
	particulate inert inorganic material	gTSS/m3
	soluble inert organics	gCOD/m3
	particulate inert organics	gCOD/m3
	unbiodegradable particulates from cell decay	gCOD/m3
	readily biodegradable substrate	gCOD/m3
	rapidly hydrolysable substrate	gCOD/m3
	slowly hydrolysable substrate	gCOD/m3
	active heterotrophic biomass	gCOD/m3
	active Nitrosomonas biomass	gCOD/m3
	active nitrifier biomass	gCOD/m3
	dissolved oxygen	gO2/m3
	nitrite N	gNm3
	nitrate N	gNm3
	soluble inert organic nitrogen (in sl)	gNm3
	particulate inert organic nitrogen (in ss)	gNm3
	free and ionized ammonia	gNm3
	soluble biodegradable organic nitrogen (in ss)	gNm3
	particulate biodegr. organic nitrogen (in ss)	gNm3
	alkalinity	mol/m3
	soluble component "a"	notset
	soluble component "b"	notset
	soluble component "c"	notset
	soluble component "d"	notset
	soluble component "e"	notset
	soluble component "f"	notset
	soluble component "g"	notset
	soluble component "h"	notset
	particulate component "a"	gCOD/m3
	particulate component "b"	gCOD/m3

A.1.4.6 Librairie CSOLIB

csolib:		
	filtered BOD5	g/m3
	suspended solids	g/m3
	soluble chemical component	g/m3
	particulate chemical component	g/m3

A.1.4.7 Librairie OPENLIB

openlib:		
	Component "a"	notset
	Component "b"	notset
	Component "c"	notset
	Component "d"	notset
	Component "e"	notset
	Component "f"	notset
	Component "g"	notset
	Component "h"	notset
	Component "i"	notset
	Component "j"	notset
	Component "k"	notset
	Component "l"	notset
	Component "m"	notset
	Component "n"	notset
	Component "o"	notset

A.1.4 Variables de GPS-X (suite)

A.1.4.5 Librairie TOTALLIB

totallib:		
Dissolved oxygen (O ₂)	g O ₂ /m ³	
Alkalinity	mole/m ³	
Hydrogen ion	mole/m ³	
VFA	g COD/m ³	
Fermentable soluble substrate	g COD/m ³	
Soluble (readily biodegradable) substrate	g COD/m ³	
Soluble inert organics	g COD/m ³	
Ammonia-ammonium (NH ₄)	g N/m ³	
Nitrate (NO ₃)	g N/m ³	
Nitrite (NO ₂)	g N/m ³	
Nitric oxide (NO)	g N/m ³	
Nitrous oxide (N ₂ O)	g N/m ³	
Dinitrogen (N ₂)	g N/m ³	
Soluble biodegradable N	g N/m ³	
Soluble inert (non biodeg.) nitrogen	g N/m ³	
Soluble P	g P/m ³	
Magnesium	g Me/m ³	
Aluminum	g Me/m ³	
Iron	g Me/m ³	
Calcium	g Me/m ³	
Particulate substrate	g COD/m ³	
Unbiodegradable decay products	g COD/m ³	
Particulate inert organics	g COD/m ³	
Ammonia oxidizers	g COD/m ³	
Nitrite oxidizers	g COD/m ³	
Active autotrophs	g COD/m ³	
Active strictly aerobic PAOs	g COD/m ³	
Active denitrifying PAOs	g COD/m ³	
Active PAOs	g COD/m ³	
Glycogen accumulating organisms	g COD/m ³	
Cell internal storage products	g COD/m ³	
Poly-beta-hydroxy-alkanoates (PHA)	g COD/m ³	
Stored glycogen	g COD/m ³	
Low DO filaments	g COD/m ³	
Low F/M filaments	g COD/m ³	
Higher microorganisms	g COD/m ³	
Active heterotrophs	g COD/m ³	
Particulate biodegradable N	g N/m ³	
Inert particulate N	g N/m ³	
Stored polyphosphate (releasable)	g P/m ³	
Stored polyphosphate (fixed)	g P/m ³	
Aluminum phosphate	g TSS/m ³	
Iron phosphate	g TSS/m ³	
Calcium phosphate (HAP + HDP)	g TSS/m ³	
Hydroxylapatite (HAP)	g TSS/m ³	
Hydroxy dicalcium phosphate (HDP)	g TSS/m ³	
Metal phosphates	g TSS/m ³	
Aluminum hydroxide	g TSS/m ³	
Iron hydroxide	g TSS/m ³	
Metal hydroxides	g TSS/m ³	
Non-volatile suspended solids (excluding metal	g TSS/m ³	
Soluble component "a"	notset	
Soluble component "b"	notset	
Soluble component "c"	notset	
Soluble component "d"	notset	
Soluble component "e"	notset	
Soluble component "f"	notset	
Soluble component "g"	notset	
Soluble component "h"	notset	
Soluble component "i"	notset	
Soluble component "j"	notset	
Particulate component "a"	notset	
Particulate component "b"	notset	
Particulate component "c"	notset	
Particulate component "d"	notset	
Particulate component "e"	notset	
Particulate component "f"	notset	
Particulate component "g"	notset	
Particulate component "h"	notset	
Particulate component "i"	notset	
Particulate component "j"	notset	

totallib composite variables:		
pH	pH units	
Soluble COD	g COD/m ³	
Particulate COD	g COD/m ³	
COD	g COD/m ³	
Inert non-volatiles	g TSS/m ³	
NOx	g N/m ³	
Soluble TKN	g N/m ³	
TKN	g N/m ³	
Total N	g N/m ³	
Soluble CBOD ₅	g O ₂ /m ³	
Soluble CBOD ₂₀	g O ₂ /m ³	
Particulate CBOD ₅	g O ₂ /m ³	
Particulate CBOD ₂₀	g O ₂ /m ³	
CBOD ₅	g O ₂ /m ³	
CBOD ₂₀	g O ₂ /m ³	
Soluble substrate	g P/m ³	state var
Soluble TP	g P/m ³	
Total P	g P/m ³	
Particulate TKN	g N/m ³	
Particulate TP	g P/m ³	
Metal hydroxides	g Me/m ³	state var
Metal phosphates	g Me/m ³	state var
Volatile suspended solid	g VSS/m ³	
Total suspended solids	g TSS/m ³	

Hydromed, Inc., with Yves Cormier, Ecole Polytechnique

(to be written by you)

brackets after divisions for padding

Notes: The shaded areas with dotted cells, in the sheets, are used by a Visual Basic macro to build the code of the model for use by GPS-X brackets after divisions for paths.

Y-24 AD IN SCIENTIFIC RESEARCH AND HISTORICAL-TECHNOLOGICAL RESEARCH 1

Steps: 1) Insert the Visual Basic macro into the spreadsheet (may not be needed if the proper macro is activated)

- 2) Run the VB macro
- 2.1) With the proper Spreadsheet containing the model to be built, select the VB macro
(Tools -> Macro -> Select Macro -> Visual Basic Editor)
- 2.2) Give an appropriate file directory in which files of an existing library (ex. CNLIB) are located (e.g. C:\Program Files\Excel\VB\Scripts\CNLIB) or a local directory (ex. C:\My Documents\Excel\VB\Scripts\CNLIB) as indicated by the "Look In:" box.
- 2.3) Give an appropriate model name (ex. M1-a). It is best to use a maximum of 5 letters, the "a-" is to identify that it is a test).
- 2.4) Run the macro (Run)

For each object 4 files are created: ex.ASM1.pfm, ASM1.pfm con, ASM1.pfm de, ASM1.pfm hi

One more file is created which is used by all objects, "thermosp.vst" (ex. ASH11asp.vst)

NH4 and P-O trends, alkalinity and TSS changes need to be added to the growth processes of heterotrophs, an aspect not fully described in ASM2d (other than in the "example stoichiometry matrix" with numerical values).

Each cell is formatted as text and not as a number.

Some coefficients under 202, 214, 203, 204, and 205 can be defined to the following extent.

- High values (0) must be specified for the phosphorus precipitation and radiation processes
- A value of 1 or -1 should be specified for the phosphorus precipitation and radiation processes
- The proper sign (+ or -) must be specified
- The proper units (e.g., $\text{mg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{d}^{-1}$) must be specified as COD , N , P or CH_4 (biogas, biobility) in the decomposition principle
- In the test case, it is calculated from COD conversion and in the latter case, it must be defined as "Type"
- "Type" coefficients are equal to the negative values of those of "Age" and only if used for determination, not as a product of inhibition
- It is advisable to compare the values obtained with those provided in the sheet "Stoic coeff" of this spreadsheet to ensure that the coefficients were properly specified
- The test does not have to be included as it is calculated as a comparable variable
- To add processes, the rates that should be added immediately below the rates in the matrix

Notes for conservation practice

$CA_2 = -(B_{\text{saturation}})(CA_1 + ICOD_1) + ICOD_2 / ICOD_2$
 Fractions must have a decimal point for floating point accuracy in calculations

A.1.6 Information relative au modèle A3TX sous forme matricielle

A3TX

9/1/99

in matrix format

by Yves Comeau, Caroline Ky, Ecole Polytechnique, Imre Takacs and Bruce Tole, Hydromantis

A3TX: ASM3 + TUD + Extra for P precipitation

Description:

This file contains the sheets used to define the reactions rates for a C, N & P model by using a matrix format. This model presents the concepts for dynamic simulation of combined biological COD, N and P removal as well as chemical P precipitation. This model is based on ASM3 for C & N removal, TUD for bio-P removal and ASM2 and Maurer and Boller (1999) for chemical P removal.

References:

- ASM3: Gujer, W., M. Henze, T. Mino and M. van Loosdrecht. 1999. Activated sludge model no. 3. Wat. Sci. Tech., 39(1): 183-193.
- TUD (Technical University of Delft, The Netherlands): Brdjanovic, D. 1998. Modeling biological phosphorus removal in activated sludge systems. Ph.D. thesis, Technical University of Delft, The Netherlands.
- ASM2: Henze, M., W. Gujer, T. Mino, T. Matsuo, M.C. Wentzel and G.v.R. Marais. 1995. Activated sludge model no. 2. IAWQ scientific and technical report no. 3. International Association on Water Quality. 32 p.
- Maurer, M. and M. Boller. 1999. Modelling of phosphorus precipitation in wastewater treatment plants with enhanced biological phosphorus removal. Wat. Sci. Tech., 39(1): 147-163.

A.1.7 Nomenclature

Naming convention for variables in GPS-X

The general convention for naming variables for all GPS-X biological models, excluding anaerobic digestion but including phosphorus precipitation, is presented below.

As much as possible, the Recommended notation for wastewater treatment processes (Grau et al., 1982; Water Research, 16:1488-1505) was used.

The name "variable" refers to components that change dynamically (ex. oxygen) as well as parameters (ex. yield) that are normally constant.

Variable name structure:

A variable name can be composed of 3 parts, an optional prefix, a descriptive name and a suffix: "P-descr-SUF"

The prefix is an optional single character, in upper case, and used to define:

M : Monod-type saturation function

I : Inhibition function

The descriptive name defines the function of the variable (see naming convention below):

As much as possible, the name of the variable used in the reference document presenting the model was used

The descriptive part of the variable name is always expressed in lower case; ex. snh4 for NH_4

The suffix is composed of 3 upper case letters that characterizes the group of microorganism or the type of reaction (ex. phosphorus precipitation) involved.

Microorganisms are indented to indicate that they belong to the above (sub-)category(ies).

Other sub-categories may be added as needed.

GEN	General; used when a coefficient applies to more than one group of microorganisms (ex. HET, PAO, NIT)
HET	Heterotrophic microorganisms (includes fixed biomass and non-PAO denitrifiers)
PAO	Phosphorus accumulating organisms (PAO)
PO2	Strict aerobic PAOs
PON	Denitrifying PAO (use NOx when O_2 absent but can use O_2 when it is present)
GAO	Glycogen accumulating microorganisms - G bacteria (does not include PAO that also store glycogen)
FIL	Filamentous microorganisms
FOO	Low DO filamentous microorganisms
FFM	Low F/M filamentous microorganisms
HIG	Higher microorganisms (ex. protozoa, rotifers)
AUT	Autotrophs (including not only nitrifiers but also others such as iron and sulfur bacteria)
NIT	Nitrifiers (autotrophs)
NNH	Ammonia oxidizers
NNO	Nitrite oxidizers
MEP	Metallic salt for phosphorus precipitation
FEF	Iron salt for phosphorus precipitation
FE2P	Iron salt Fe^{2+} for phosphorus precipitation (more or less useful as Fe^{2+} is transformed into Fe^{3+})
FE3P	Iron salt Fe^{3+} for phosphorus precipitation
ALP	Aluminum salt for phosphorus precipitation
CAP	Calcium salt involved in phosphorus precipitation

Notes:

Floc forming microorganisms are not specified but can be estimated as a composite variable, by adding the biomass of the appropriate groups of microorganisms.

CONVENTION FOR DESCRIPTIVE NAME (based as much as possible on Grau et al., 1982)

The descriptive name can be made of 4 parts: a) a function descriptor (optional), b) a substrate (to product; opt.), c) a microbial or chemical activity (opt.) and d) the redox conditions (opt.)

Examples:

- "snh4" is ammonia, a soluble component
- "Msc2NIT" is the Monod saturation function (M) for nitrifying autotrophs (N) for oxygen (so2)
- "kso2NNH" is the half saturation coefficient for oxygen for ammonia oxidizers
- "yfsaHET", consists of "y", "sf", "sa" and "HET", and is the yield of fermentation of sf into sa by the heterotrophs
- "arrsnh4NIT", consists of "arr", "k", "snh4" and "NIT", and is the Arrhenius coefficient for the half-saturation coefficient of ammonia for nitrifiers

a) Function descriptors:

arr Arrhenius temperature constant
eta correction factor
f fraction
k rate, saturation constant
mu max growth rate
q max specific rate
r rate
y yield

b) Substrates, products (or biomass; no need to specify the type of biomass if it is the same as that of the suffix)

State or composite variables (see also the complete list)

gch4 methane gas
gco2 carbon dioxide gas
sca calcium
si soluble inert organic matter
snh4 ammonia
sno2 nitrite

sno3nitrate
 snonitrate + nitrite
 so2 oxygen as electron acceptor
 stor soluble toxic chemical
 xi particulate inert organic matter
 xpha poly- β -hydroxyalcanoates
 xpo4phosphate
 xpp polyphosphates
 Others
 bm biomass
 s soluble
 x particulate, biomass

c) Microbial or chemical activity

den denitrification
 end endogenous respiration, maintenance
 fer fermentation
 inh inhibition
 lim limited (for P limited conditions)
 lys lysis, hydrolysis
 nut nutrient used for growth (for NH_4 , NO_3 and PO_4 as nutrients)
 pre precipitation (for metal - P precipitation)
 red redissolution (for metal - P precipitation)
 rel release (for P from PAO)
 sto storage

d) Redox conditions

an anaerobic
 ox anoxic
 o2 aerobic (not "so2" which is soluble O_2 as electron acceptor)

A.1.8 Remarques

- 1) La cellule K41 de la matrice (correspondant au coefficient de conservation du COD pour l'azote) devrait contenir un coefficient de -1,71. Son inclusion a cependant provoqué quelques problèmes dans la construction du modèle sur GPS-X. Le Model Developer est encore actuellement en développement, et ce problème devrait être résolu (contact: Snowling@hydromantis.com)
- 2) Un coefficient de (-2,86) a été donné pour le coefficient de conservation du COD pour les nitrates (cellule J41). Cependant, ce coefficient n'est valide que pour les réactions de dénitrification. Le coefficient relatif à l'oxygène pour la nitrification (c13,COD) a été ajusté "manuellement" dans le fichier A3TX.sbr contenu dans la librairie de GPS-X générée. Cet aspect est également "en développement".

ANNEXE II

PROGRAMMES DE SIMULATION ÉCRITS SUR MATLAB

Ci-joint une disquette contenant le programme d'appel (a3txapl), le programme appelé pour les phases non aérée et aérée (a3tx) et le programme appelé pour la phase de sédimentation (a3txse). Les conditions initiales dans la liqueur mixte du RBS-pilote sont définies dans le fichier a3txini.mat.

- Le programme d'appel "a3txapl" décrit les concentrations affluentes, la cyclologie du RBS, le coefficient de transfert d'oxygène (k_{La}) et les paramètres stoechiométriques et cinétiques du modèle. (annexe 2.1)
- Le programme appelé pour les phases non aérée et aérée, "a3tx", contient les taux de réaction et les équations différentielles. (annexe 2.2)
- La phase de sédimentation est modélisée en posant tous les taux de réaction égaux à 0 tel que présenté dans le programme "a3txse". (annexe 2.3)

Nota Bene:

Une erreur a été commise dans le calcul des concentrations diluées des composés solubles. Pour un composé i donné, la concentration de dilution a été calculée ainsi:

$$SiD = (Q \cdot Si(I) + Q \cdot SiF) / V$$

Ce qui correspond à une évacuation de la moitié du volume du réacteur.

En fait, l'expression correcte serait:

$$SiD = (3 \cdot Si(I) + Q \cdot SiF) / V$$

Ce qui correspond à une évacuation du quart du volume du réacteur.

L'impact de cette erreur a été évalué:

- **Le calcul des concentrations des composés particuliers n'est pas affecté.**
- **Le calcul des concentrations des composés solubles dont la concentration est nulle à la fin d'un cycle n'est pas affecté.**
- **les résultats obtenus sur GPS-X ne sont pas affectés.**
- **le profil des composés solubles ne semble pas être affecté de façon majeure.**

Cependant, des corrections mineures (en même temps que la modification proposée pour la modélisation du magnésium) devront éventuellement être effectuées sur les ajustements de paramètres proposés pour la calibration du modèle.

A.2.1 Programme d'appel

```
% A3TX - Programme d'appel

clear;

global y dSodt Kla V

%%% Facteurs de conversion

global iNSI iNXI iNSF iNXS iNBM
global iPSI iPXI iPSF iPXS iPBM
global iTSSXI iTSSXS iTSSBM iTSSSTO

% Azote
iNSI = 0.01; % contenu azoté de SI (gN/gSI-DCO)
iNXI = 0.03; % contenu azoté de XI (gN/gXI-DCO)
iNSF = 0.03; % contenu azoté de SS (gN/gSS-DCO)
iNXS = 0.04; % contenu azoté de XS (gN/gXS-DCO)
iNBM = 0.07; % contenu azoté de la biomasse (gN /gDCO biomasse)

% Phosphore
iPSI = 0 ; % contenu en phosphore de SI (gP/gSI-DCO)
iPXI = 0.01 ; % contenu en phosphore de XI (gP/gXI-DCO)
iPSF = 0.01 ; % contenu en phosphore de SS (gP/gSS-DCO)
iPXS = 0.01 ; % contenu en phosphore de XS (gP/gXS-DCO)
iPBM = 0.02 ; % contenu en phosphore de la biomasse particulaire
(gN/gDCO - XPAO)

% MES totales
iTSSXI = 0.75 ; % Rapport des MES sur XI-DCO (gTSS/gXI-DCO)
iTSSXS = 0.75 ; % Rapport des MES sur XS-DCO (gTSS/gXS-DCO)
iTSSBM = 0.9 ; % Rapport des MES sur la biomasse particulaire-DCO
(gTSS/gXPAO,XA,XH-DCO)
iTSSSTO = 0.60; %Rapport des MES sur XSTO( gTSS/gXSTO-DCO)

% CONDITIONS D'OPERATION (RBS-PILOTE, période 1b)

V = 1860; % volume du réacteur, valeur exp. de la periode 1b (L)
Q = 465; % volume alimenté au début de chaque cycle (L), valeur exp.-
période 1b

% - - -
global ...
YPO4 ...
YPHA ...
YGLY ...
YPHAO ...
YPPO ...
YGLYO ...
deltaO ...
YPHANO ...
YPPNO ...
```

YGLYNO ...
 deltaN ...
 mATP ...
 YAUT ...
 fI ...
 kh ...
 Kx ...
 qfe ...
 Kfe ...
 nuH ...
 kSTO ...
 etaHNO3 ...
 KO ...
 KNO ...
 Ks ...
 KSTO ...
 KNH ...
 KHCO ...
 bHO2 ...
 bHNO ...
 bSTO02 ...
 bSTONO ...
 nuAUT ...
 KANH ...
 KAO ...
 KAHCO ...
 bAO2 ...
 bANO ...
 qsmax ...
 mAN ...
 mO2 ...
 mNO ...
 mPAOO ...
 mPAONO ...
 KPA ...
 KPNO3 ...
 KPO2 ...
 KPALK ...
 KPNH4 ...
 KPPO4 ...
 KPPHA ...
 KPGLY ...
 KPPF ...
 KHP ...
 qPP ...
 KPPMAX ...
 kPHA ...
 kPP ...
 kGLY ...
 etaPNO3 ...
 KHDP1 ...
 KHDP2 ...
 KHAP ...

```

kHDP ...
SCa ...
pH ...
kpreFEP ...
kredFEP ...
KsalkFEP ...
Mg ...
Mgexp ...
texp ...
% - - -

%% PAO

% Coefficients de rendement

% En conditions anaerobies:

YPO4 = 0.22;
% valeur par défaut :YPO4 = 0.44; % rapport PO4 libéré sur acétate
consommé (gP libérés/gDCO-acétate consommé)

YPHA = 1.5 ; % rapport PHA stockés sur acétate consommé (gDCO-PHA
stockés/gDCO-acetate consommé)

YGLY = 0.5 ; % rapport glycogène consommé sur acétate consommé (gDCO-
glycogène consommé/gDCO acétate consommé)

% En conditions aérobies:
YPHAO = 1.8 ; % coefficient de rendement du PHA consommé sur la
biomasse formée (gDCO-PHA consommé/gDCO-biomasse bioP active formée)
%Valeur par défaut: YPHAO = 1.44;

YPPPO = 4.49; % coefficient de rendement des polyP synthetisés sur la
biomasse formée en cond. aer. (gP-polyP formes/g DCO - biomasse bioP
active formée)

YGLYO = 1.28 ; % coefficient de rendement du glycogène synthetisé sur
la biomasse formée en cond.aer (g DCO- glycogène formé / g DCO -
biomasse bioP active formée)

% En conditions anoxies:
YPHANO = 2.2 ; % coefficient de rendement du PHA consommé sur la
biomasse bioP formée (rapport PHA consommés sur biomasse bioP formée)
(g DCO - PHA consommés /g DCO biomasse bioP formée)

% valeur par défaut: YPHANO = 1.76;

YPPNO = 2.61; % coefficient de rendement des PolyP synthetisés sur la
biomasse bioP formée (rapport PolyP synthetisés sur biomasse bioP
formée ) (g P-PolyP synthetisés/g DCO-biomasse bioP formée

```

YGLYNO = 1.59; % coefficient de rendement du glycogène synthétisé sur la biomasse bioP formée (gDCO-glycogène formé/g DCO- biomasse bioP formée)

deltaN = 1.8; % quantité d'ATP produits par NADH consommé en conditions anoxies (mol ATP produits/mol NADH consommé)

mATP = 0.456; % Consommation d'ATP pour la maintenance

%% AUTOTROPHES

YAUT = 0.24 ; % taux de croissance de la biomasse autotrophe (g DCO-XA formée/g N-NO₃ formés)

%% Respiration Endogène des Autotrophes et des Hétérotrophes:

fI = 0.08;

%%% Constantes cinétiques

%% Hydrolyse

kh = 3 ; % @ 20 C, taux d'hydrolyse du substrat lentement

biodegradable Xs (g Xs hydrolysés-DCO / g XH)

Kx = 1 ; % @ 20 C , Constante de saturation pour l'hydrolyse (gXS-DCO/gXH)

%% Fermentation

qfe = 3; % @ 20 C, taux maximal de fermentation (g SF-DCO fermenté/g XH-DCO présente)

Kfe = 20; % @ 20 C, Coefficient de saturation pour la fermentation de SF (mg SF-DCO/L)

%% hétérotrophes - Dénitrification (ASM3)

nuH = 2 ; % @ 20 C, taux max. de croissance des hétérotrophes (g DCO - XH formée/ g DCO-XSTO consommé * d)

kSTO = 5; % @ 20 C, taux de stockage du SS sous forme de XSTO (g SS consommé/g XH présente * d)

etaHNO₃ = 0.8 ; % facteur de correction (réduction) pour la croissance des het. en cond. anoxies

KO = 0.2; % Constante de saturation pour l'oxygène (mgO₂/L)

KNO = 0.5; % constante de saturation pour les nitrates (mg N-NO₃/L)

Ks = 2 ; % constante de saturation pour le substrat SS (SF + SA) (mg DCO-SS/L)

KSTO = 1 ; % constante de saturation pour XSTO (mg XSTO/L)

KNH = 0.01 ; % coefficient de saturation pour le N ammoniacal (nutriment pour la croissance des het.) (mgN-NH₄/L)

KHCO = 0.1 ; % coefficient de saturation pour les bicarbonates (mmole HCO₃/L)

$b_{HO2} = 0.2$; % @ 20 C, taux de respiration endogène en conditions
aérobies de XH ($g\ XH / g\ XH \cdot d$)
 $b_{HNO} = 0.1$; % @ 20 C, taux de respiration endogène en conditions
anoxies de XH
 $b_{STO2} = 0.2$; % @ 20 C, taux de respiration de XSTO en conditions
aérobies ($g\ XSTO / g\ XH \cdot d$)
 $b_{STONO} = 0.1$; % @ 20 C, taux de respiration de XSTO en conditions
anoxies ($g\ XSTO / g\ XH \cdot d$)

% autotrophes (ASM3)

$\mu_{AUT} = 1$; % taux max. de croissance des autotrophes ($g_{XA-DCO}/g_{NO3-N} \cdot d$)
 $K_{ANH} = 1$; % constante de saturation en azote ammoniacal pour la
croissance de XAUT ($mg\ N-NH_4/L$)
 $K_{AO} = 0.5$; % constante de saturation en oxygène pour XAUT ($mg\ O_2/L$)
 $K_{AHCO} = 0.5$; % constante de saturation en bicarbonates pour XAUT ($mmole\ HCO_3/L$)
 $b_{AO2} = 0.15$; %tx de resp. endogène de XAUT en conditions aérobies ($g_{XA-DCO}\ respiree/g_{DCO-XAUT}\ presente \cdot d$)
 $b_{ANO} = 0.05$; %tx de resp. endogène de XAUT en conditions anoxies
($g_{XA-DCO}\ respiree/g_{DCO-XAUT}\ presente \cdot d$)

% PAO (TUDelft)

$q_{smax} = 9.67$; % taux spécifique maximal de consommation d'acétate en
conditions anaérobies ($g\ acetate-DCO/g\ XPAO-DCO \cdot d$)

% coefficients de maintenance

$m_{AN} = 0.05$; % coefficient de maintenance des PAO en conditions
anaérobies ($g_P\ relargue/g_{DCO-XPAO} \cdot d$)
 $m_{O2} = 0.06$; % coefficient de maintenance des PAO en conditions aérobies
($g_{DCO}\ consommée-PHA/g_{DCO-XPAO} \cdot d$)
 $m_{NO} = 0.02$; % coefficient de maintenance des PAO en conditions anoxies
($g_N\ consomme-nitrates/g_{DCO-XPAO} \cdot d$)
 $m_{PAO} = 0.07$; % consommation de la biomasse PAO pour la maintenance
aérobie ($g_{DCO-XPAO}\ consommées/g\ DCO-XPAO\ presente$)
 $m_{PAONO} = 0.06$; % consommation de la biomasse PAO pour la maintenance
anoxie ($g_{DCO-XPAO}\ consommées/g\ DCO-XPAO\ presente$)

% Constantes de saturation

$K_{PA} = 4$; % coefficient de saturation pour l'acétate ($mg\ acetate-DCO/L$)
 $K_{PNO3} = 1.4$; % coefficient de saturation pour les nitrates ($mg\ N-NO_3/L$)
 $K_{PO2} = 0.2$; % coefficient de saturation pour l'oxygène ($mg\ O_2/L$)
 $K_{PALK} = 0.1$; % coefficient de saturation pour l'alcalinité ($mmol\ HCO_3/L$)
 $K_{PNH4} = 0.05$; % coefficient de saturation pour le N ammoniacal ($mg\ N-NH_4/L$)

KPP04 = 3.1; % coefficient de saturation pour le Phosphore soluble (mg P/L)
 KPPHA = 0.01; % coefficient de saturation pour le PHA (mg DCO-PHA/L)
 KPGLY = 0.01; % coefficient de saturation pour le glycogène (mg DCO-glycogène/L)
 KPPP = 0.01; % coefficient de saturation pour les polyP (mg P-polyP/L)
 KHP = 0.01; % coefficient de saturation du P dans les réactions de bioP
 gPP = 0.1; % facteur de sensibilité (de réduction) aux nitrates pour la formation de poly-P

%KPPMAX = 0.36; % Rapport maximal XPP/XPAO (Filipe et Daigger)

% taux de consommation et de formation des composés de stockage des PAO

kPHA = 7.55; %taux de consommation du PHA (g DCO-PHA/g DCO-biomasse bioP * d)
 kPP = 0.07; % taux de formation des poly-P (g P-polyP formés/g DCO-biomasse bioP * d)
 %valeur par défaut: kPP = 0.11;
 kGLY = 0.15; % taux de formation du glycogène (g DCO-glycogène/g DCO-biomasse bioP * d)

etaPNO3 = 0.8; % facteur de réduction en conditions anoxies

%% PRECIPITATION DU PHOSPHORE AVEC DES METAUX

% Maurer et al.:

kHDP = 0.29; % gCa/m3*d (a 20 C) coefficient pour la précipitation du XHDP

kHAP = 15.5; % gP/m3*d (a 20 C) coefficient pour la précipitation du XHAP

KHDP1 = 3e-2; % Coeff. Hyperbolique pour la précipitation du XHDP (mgP/mgTSS)

KHDP2 = 3e-5; % Coeff. Hyperbolique pour la préc. du XHAP (mgP/mgTSS)

%ASM2 :

kpreFEP = 1; % m3/(gFe(OH)3)*d

kredFEP = 0.6; % d-1

KsalkFEP = 0.50; % mmoleHCO3-/L

% Chargement des valeurs initiales pour les simulations

load C:\a3txini;

%y = [0 2 0 0 0 0 0 12 0 0 5060 200 7000 76 2000 0 21 200 250 300 10 20 100 10 10 49]

```
% Assignment des valeurs initiales aux variables du modèle contenues
dans le fichier a3txini.mat
```

```
% Concentrations a l'alimentation (effluent du fermenteur-pilote,
periode 1b) en mg/L
```

```
SoF = 0;
SIF = 48 ;
SFF = 440;
SNHF =40.3 ;
SN2F = 0 ;
SNOF = 0;
SHCOF = 8 ;
```

```
XIF = 55 ;
XSF = 0;
XHF = 697 ;
XSTOF = 0;
XTSSF = 890 ;
XAF = 0 ;
XPAOF = 0 ;
SAF = 1182 ;
SPO4F = 62.6 ;
  XPHAF = 0;
  XPPF = 0 ;
XGLYF = 0 ;
MgF = 8;
XHDPF =0;
XHAPF = 0;
XFeOHF = 0;
XFePF = 0;
  KF = 71;
```

```
% Définition des variables d'état
```

```
So = y(2);
SI = y(3);
SF = y(4);
SNH = y(5);
SN2 = y(6);
SNO = y(7);
SHCO = y(8);
```

```
XI = y(9);
XS = y(10);
XH = y(11);
XSTO = y(12);
XTSS = y(13);
XA = y(14);
```

```
XPAO = y(15);
```

```

SA = y(16);
SPO4 = y(17);
  XPHA = y(18);
  XPP = y(19);
XGLY = y(20);
Mg = y(21);
XHDP = y(22);
XHAP = y(23);
XFeOH = y(24);
XFeP = y(25);
  K = y(26);

```

```
Result = y;
```

```

for Cycle = 0:1:10 , %boucle de simulation
  Qlm = 45 ; %purge de liqueur mixte pour un cycle, valeur exp. -
  periode lb
  l = length(So);

```

```
% Calcul de la Dilution à l'alimentation %
```

```

SoD = 0; % (Q.*So(1) + Q.*SoF)./V;
SID = (Q.*SI(1) + Q.*SIF)./V;
  % correction: SID = (3.*Q.*SI(1) + Q.*SIF)./V;
SFD = (Q.*SF(1) + Q.*SFF)./V;
  % correction : SFD = (3.*Q.*SF(1) + Q.*SFF)./V;
SNHD = (Q.*SNH(1) + Q.*SNHF)./V;
  % correction: SNHD = (3.*Q.*SNH(1) + Q.*SNHF)./V;
SN2D = (Q.*SN2(1) + Q.*SN2F)./V;
  % correction: SN2D = (3.*Q.*SN2(1) + Q.*SN2F)./V;
SNOD = (Q.*SNO(1) + Q.*SNOF)./V;
  % correction: SNOD = (3.*Q.*SNO(1) + Q.*SNOF)./V;
SHCOD = (Q.*SHCO(1) + Q.*SHCOF)./V;
  % correction: SHCOD = (3.*Q.*SHCO(1) + Q.*SHCOF)./V;

```

```

XID = ((V - Qlm).*XI(1) + Q.*XIF)./V;
XSD = ((V - Qlm).*XS(1) + Q.*XSF)./V;
XHD = ((V - Qlm).*XH(1) + Q.*XHF)./V;
XSTOD = ((V - Qlm).*XSTO(1) + Q.*XSTOF)./V;
XTSSD = ((V - Qlm).*XTSS(1) + Q.*XTSSF)./V;
XAD = ((V - Qlm).*XA(1) + Q.*XAF)./V;

```

```

XPAOD = ((V - Qlm).*XPAO(1) + Q.*XPAOF)./V;
SAD = (Q.*SA(1) + Q.*SAF)./V;
  % correction : SAD = (3.*Q.*SA(1) + Q.*SAF)./V;
SPO4D = (Q.*SPO4(1) + Q.*SPO4F)./V;
  % correction : SPO4D = (3.*Q.*SPO4(1) + Q.*SPO4F)./V;
XPHAD = ((V - Qlm).*XPHA(1) + Q.*XPHAF)./V;
XPPD = ((V - Qlm).*XPP(1) + Q.*XPPF)./V;
XGLYD = ((V - Qlm).*XGLY(1) + Q.*XGLYF)./V;
MgD = (Q.*Mg(1) + Q.*MgF)./V;
  % correction: MgD = (3.*Q.*Mg(1) + Q.*MgF)./V;

```

```

XHDPD = ((V - Qlm).*XHDP(1) + Q.*XHDPF)./V;
XHAPD = ((V - Qlm).*XHAP(1) + Q.*XHAPF)./V;

XFeOHD = ((V - Qlm).*XFeOH(1) + Q.*XFeOHF)./V;
XFePD = ((V - Qlm).*XFeP(1) + Q.*XFePF)./V;

KD = (Q.*K(1) + Q.*KF)./V;
% correction: KD = (3.*Q.*K(1) + Q.*KF)./V;

% Vecteur des concentrations diluées

yD = [SoD SID SFD SNHD SN2D SNOD SHCOD XID XSD XHD XSTOD XTSSD XAD
XPAOD SAD SPO4D XPHAD XPPD XGLYD MgD XHDPD XHAPD XFeOHD XFePD KD];
options = odeset('RelTol',1e-3,'AbsTol',1e-3);

% PHASE ANAEROBIE

t0 = (Cycle*12)/24; % temps initial au début de 1ère phase anaérobie
tf = (Cycle*12 + 3)/24; % temps à la fin de la 1ère phase anaérobie
Kla = 0;
SCa = 57;
pH = 7;

%Résolution des équations associées à la période anaérobie

[t1,y1] = ode23s('a3tx',[t0 tf],yD,options);

tf

yD = y1(size(y1,1),:);

%PHASE AEROBIE

t0 = (Cycle*12 + 3)/24; %temps au début de la 1ère phase aérobie
tf = (Cycle*12 + 7)/24; % temps à la fin de la 1ère phase aérobie

Kla = 500;
SCa = 37;
pH = 7.7;

%Résolution des équations associées à la période aérobie

[t2,y2] = ode23s('a3tx',[t0 tf],yD,options);

tf

yD = y2(size(y2,1),:);

```

%PHASE NON AEREE

```

t0 = (Cycle*12 + 7)/24; % temps au début de la phase non aérée
tf = (Cycle*12 + 8.5)/24; % temps à la fin de la phase non aérée
Kla = 0;
SCa = 37;
pH = 7.7;

```

```

% Résolution des équations associées à la période non aérée

```

```

[t3,y3] = ode23s('a3tx',[t0 tf],yD,options);

```

```

tf

```

```

yD = y3(size(y3,1),:);

```

%PHASE AEREE

```

t0 = (Cycle*12 + 8.5)/24;% temps au début de la phase aérée
tf = (Cycle*12 + 11)/24; % temps à la fin de la phase aérée
%Kla = 1440;
Kla = 500;

```

```

%Résolution des équations associées à la période aérée

```

```

[t4,y4] = ode23s('a3tx',[t0 tf],yD,options);

```

```

tf

```

```

yD = y4(size(y4,1),:);

```

%PHASE DE SEDIMENTATION

```

t0 = (Cycle*12 + 11)/24; %temps au début de la phase de
sédimentation
tf = (Cycle*12 + 12)/24; % temps à la fin de la phase de
sédimentation
Kla = 0;

```

```

% Résolution des équations associées à la période de sédimentation

```

```

[t5,y5] = ode23s('a3txse',[t0 tf],yD,options);

```

```

tf

```

```

yD = y5(size(y5,1),:);

```

```

t = [t1;t2;t3;t4;t5];

```

```

y = [y1;y2;y3;y4;y5];

Result = [Result; [t y]];

%Définition des variables d'état comme vecteurs de la matrice Result
%
Cycle
t = Result(:,1);
So = Result(:,2);
SI = Result(:,3);
SF = Result(:,4);
SNH = Result(:,5);
SN2 = Result(:,6);
SNO = Result(:,7);
SHCO = Result(:,8);
XI = Result(:,9);
XS = Result(:,10);
XH = Result(:,11);
XSTO = Result(:,12);
XTSS = Result(:,13);
XA = Result(:,14);
XPAO = Result(:,15);
SA = Result(:,16);
SPO4 = Result(:,17);
XPHA = Result(:,18);
XPP = Result(:,19);
XGLY = Result(:,20);
Mg = Result(:,21);
XHDP = Result(:,22);
XHAP = Result(:,23);
XFeOH = Result(:,24);
XFeP = Result(:,25);
K = Result(:,26);

end

y = [0 Result(length(Result),2:26)];

save C:\a3txini y;

figure(1);

subplot(3,2,1);
plot(t,So);
ylabel('So');

subplot(3,2,2);
plot(t,SI);

```

```
ylabel('SI');  
  
subplot(3,2,3);  
plot(t,SF);  
ylabel('SF');
```

```
subplot(3,2,4);  
plot(t,SN2);  
ylabel('SN2');
```

```
subplot(3,2,5);  
plot(t,SHCO);  
ylabel('SHCO');
```

```
subplot(3,2,6);  
plot(t,XI);  
ylabel('XI');
```

```
figure (2);
```

```
subplot(3,2,1);  
plot(t,XS);  
ylabel('XS');
```

```
subplot(3,2,2);  
plot(t,XH);  
ylabel('XH');
```

```
subplot(3,2,3);  
plot(t,XSTO);  
ylabel('XSTO');
```

```
subplot(3,2,4);  
plot(t,XTSS);  
ylabel('XTSS');
```

```
subplot(3,2,5);  
plot(t,XA);  
ylabel('XA');
```

```
subplot(3,2,6);  
plot(t,XPAO);  
ylabel('XPAO');
```

```
figure(3);
```

```

subplot(3,2,1);
plot(t,XPHA);
ylabel('XPHA');

subplot(3,2,2);
plot(t,XPP);
ylabel('XPP');

subplot(3,2,3);
plot(t,XGLY);
ylabel('XGLY');

subplot(3,2,4);
plot(t,XHDP);
ylabel('XHDP');

subplot(3,2,5);
plot(t,XHAP);
ylabel('XHAP');
title('Hydroxyapatite');

subplot(3,2,6);
plot(t,XFeOH);
ylabel('XFeOH');

figure(4);

subplot(3,2,1);
plot(t,XFeP);
ylabel('XFeP');

figure (5);

texp = [0 0.33/24 0.67/24 1/24 1.5/24 2/24 3/24 3.33/24 3.67/24 4/24
4.5/24 5/24 6/24 7/24 7.33/24 7.67/24 8/24 8.5/24 11/24 12/24 12.33/24
12.67/24 13/24 13.5/24 14/24 15/24 15.33/24 15.67/24 16/24 16.5/24
17/24 18/24 19/24 19.33/24 19.67/24 20/24 20.5/24 23/24 1 24.33/24
24.67/24 25/24 25.5/24 26/24 27/24 27.33/24 27.67/24 28/24 28.5/24
29/24 30/24 31/24 31.33/24 31.67/24 32/24 32.5/24 35/24 36/24]';

SPO4exp = [20.6 75.3 107.5 114.3 112.3 113.7 113.9 90.3 55.8 38.4 24.7
20.1 12.1 9 8.5 9.4 11.6 14.4 6.4 6.4 75.3 107.5 114.3 112.3 113.7
113.9 90.3 55.8 38.4 24.7 20.1 12.1 9 8.5 9.4 11.6 14.4 6.4 6.4 75.3
107.5 114.3 112.3 113.7 113.9 90.3 55.8 38.4 24.7 20.1 12.1 9 8.5 9.4
11.6 14.4 6.4 6.4]';

Mgexp = [2 9.5 16.7 17.7 16.8 15.5 16.7 12.2 7.8 4.5 2.6 1.8 0.3 0.1
0.1 0.1 0.1 0.4 0.1 0.1 9.5 16.7 17.7 16.8 15.5 16.7 12.2 7.8 4.5 2.6
1.8 0.3 0.1 0.1 0.1 0.1 0.4 0.1 0.1 9.5 16.7 17.7 16.8 15.5 16.7 12.2
7.8 4.5 2.6 1.8 0.3 0.1 0.1 0.1 0.1 0.4 0.1 0.1]';

```



```
plot(t, SPO4, t, Mg, texp, SPO4exp, 'm+', texp, Mgexp, 'm*');
ylabel('SPO4 simulé et SPO4 exp.');
```

title('Comparaison des profils expérimental et simulé de SPO4 et de Mg');

```
figure(6);
texp = [0 0.33/24 0.67/24 1/24 1.5/24 2/24 3/24 3.33/24 3.67/24 4/24
4.5/24 5/24 6/24 7/24 7.33/24 7.67/24 8/24 8.5/24 11/24 12/24 12.33/24
12.67/24 13/24 13.5/24 14/24 15/24 15.33/24 15.67/24 16/24 16.5/24
17/24 18/24 19/24 19.33/24 19.67/24 20/24 20.5/24 23/24 1 24.33/24
24.67/24 25/24 25.5/24 26/24 27/24 27.33/24 27.67/24 28/24 28.5/24
29/24 30/24 31/24 31.33/24 31.67/24 32/24 32.5/24 35/24 36/24]';
Mgexp = [2 9.5 16.7 17.7 16.8 15.5 16.7 12.2 7.8 4.5 2.6 1.8 0.3 0.1
0.1 0.1 0.1 0.4 0.1 0.1 9.5 16.7 17.7 16.8 15.5 16.7 12.2 7.8 4.5 2.6
1.8 0.3 0.1 0.1 0.1 0.1 0.4 0.1 0.1 9.5 16.7 17.7 16.8 15.5 16.7 12.2
7.8 4.5 2.6 1.8 0.3 0.1 0.1 0.1 0.1 0.4 0.1 0.1]';
plot(t, Mg, texp, Mgexp, 'm+');
ylabel('Mg simulé et Mg exp');
```

```
figure(7);
```

```
texp = [0 0.33/24 0.67/24 1/24 1.5/24 2/24 3/24 3.33/24 3.67/24 4/24
4.5/24 5/24 6/24 7/24 7.33/24 7.67/24 8/24 8.5/24 11/24 12/24 12.33/24
12.67/24 13/24 13.5/24 14/24 15/24 15.33/24 15.67/24 16/24 16.5/24
17/24 18/24 19/24 19.33/24 19.67/24 20/24 20.5/24 23/24 1 24.33/24
24.67/24 25/24 25.5/24 26/24 27/24 27.33/24 27.67/24 28/24 28.5/24
29/24 30/24 31/24 31.33/24 31.67/24 32/24 32.5/24 35/24 36/24]';

SNHexp = [10.1 8.5 9 7.8 7.3 7.6 7.6 5.3 3.6 1.4 0.2 0 0 0 0 0 0 0 0
8.5 9 7.8 7.3 7.6 7.6 5.3 3.6 1.4 0.2 0 0 0 0 0 0 0 0 8.5 9 7.8 7.3
7.6 7.6 5.3 3.6 1.4 0.2 0 0 0 0 0 0 0 0 0 ]';
SNOexp = [0 0.1 0 0 0 0 0 0.5 1.3 2.4 3.3 3.3 2.9 2.5 2 0.2 0 0 0 0 0.1
0 0 0 0 0 0.5 1.3 2.4 3.3 3.3 2.9 2.5 2 0.2 0 0 0 0 0.1 0 0 0 0 0.5
1.3 2.4 3.3 3.3 2.9 2.5 2 0.2 0 0 0 0]';
```

```
plot(t, SNH, t, SNO, texp, SNHexp, 'm+', texp, SNOexp, 'm*');
title('profil simulé et expérimental du SNH4 et du SNO');
```

```
figure(8);
tAN = [0 0.33/24 0.67/24 1/24 1.5/24 2/24 3/24 12/24 12.33/24 12.67/24
13/24 13.5/24 14/24 15/24 1 24.33/24 24.67/24 25/24 25.5/24 26/24 27/24
]';
AGVexp = [296 159 26 0 0 9 11 296 159 26 0 0 9 11 296 159 26 0 0 9
11]';
```

```
plot(t, SA, tAN, AGVexp, 'm+');
title('profil simulé du SA et profil expérimental des AGV');
```

```
%figure(9);
```

```
%texp = [0 0.33/24 0.67/24 1/24 1.5/24 2/24 3/24 3.33/24 3.67/24 4/24
4.5/24 5/24 6/24 7/24 7.33/24 7.67/24 8/24 8.5/24 11/24 12/24 12.33/24
12.67/24 13/24 13.5/24 14/24 15/24 15.33/24 15.67/24 16/24 16.5/24
17/24 18/24 19/24 19.33/24 19.67/24 20/24 20.5/24 23/24 1 24.33/24
24.67/24 25/24 25.5/24 26/24 27/24 27.33/24 27.67/24 28/24 28.5/24
29/24 30/24 31/24 31.33/24 31.67/24 32/24 32.5/24 35/24 36/24]';

%Kexp = [49 73 100 100 107 116 108 112 83 70 63 62 52 50 49 49 53 60 41
41 73 100 100 107 116 108 112 83 70 63 62 52 50 49 49 53 60 41 41 73
100 100 107 116 108 112 83 70 63 62 52 50 49 49 53 60 41 41 ]';

%plot(t,K,texp,Kexp,'m+');
%ylabel('K expérimental et simulé');
```

A.2.2 Programme appelé pour les phases non aérée et aérée

```
% PROGRAMME APPELE POUR LES PHASES NON AEREE ET AEREE
```

```
function dxdt = asm3tud(t,x);

global y dSodt Kla

global iNSI iNXI iNSF iNXS iNBM
global iPSI iPXI iPSF iPXS iPBM
global iTSSXI iTSSXS iTSSBM iTSSSTO
global ...
YPO4 ...
YPHA ...
YGLY ...
YPHAO ...
YPPO ...
YGLYO ...
deltaO ...
YPHANO ...
YPPNO ...
YGLYNO ...
deltaN ...
mATP ...
YAUT ...
fI ...
kh ...
Kx ...
qfe ...
Kfe ...
nuH ...
kSTO ...
etaHNO3 ...
KO ...
KNO ...
Ks ...
KSTO ...
KNH ...
```

KHCO ...
 bHO2 ...
 bHNO ...
 bSTOO2 ...
 bSTONO ...
 nuAUT ...
 KANH ...
 KAO ...
 KAHCO ...
 bAO2 ...
 bANO ...
 qsmax ...
 mAN ...
 mO2 ...
 mNO ...
 mPAOO ...
 mPAONO ...
 KPA ...
 KENO3 ...
 KPO2 ...
 KPALK ...
 KPNH4 ...
 KPPO4 ...
 KPPHA ...
 KPGLY ...
 KPPP ...
 KHP ...
 gPP ...
 KPPMAX ...
 kPHA ...
 kPP ...
 kGLY ...
 etaPNO3 ...
 KHDP1 ...
 KHDP2 ...
 kHAP ...
 kHDP ...
 kpreFEP ...
 kredFEP ...
 KsalkFEP ...
 SCa ...
 pH ...
 Mg ...
 Mgint ...
 texp ...
 Mgexp ...

% DEFINITION DES VARIABLES D'ETAT %

% Enlèvement du C (ASM3) %

% substrats

So = x(1); %conc. en O2 dissous (mg O2/L)
 SI = x(2); % conc. en substrat inerte (mg DCO/L)
 SF = x(3); % conc. en substrat organique facilement biodégradable fermentable (mg DCO/L)
 SNH = x(4); % conc. en N ammoniacal (mg N/L)
 SN2 = x(5); % conc. en azote (mgN/L)
 SNO = x(6); % conc. en nitrites et nitrates (mg N/L)
 SHCO = x(7); % alcalinité (HCO3-) (mol(HCO3-)/L)

% composés particuliers

XI = x(8); % conc. en matière inerte particulaire (mg DCO/L)
 XS = x(9); % conc. en substrat lentement biodégradable (mg DCO/L)
 XH = x(10); % conc. en biomasse hétérotrophe (mg DCO/L)
 XSTO = x(11); % conc. en produit de stockage intracellulaire des het. (mg DCO/L)
 XTSS = x(12); % conc. en MES totales (mg MES/L)
 XA = x(13); % conc. en biomasse autotrophe (mg DCO/L)

% Enlèvement du P (Murnleitner) %

XPAO = x(14); % conc. en biomasse bioP ACTIVE
 SA = x(15); % conc. en acetate
 SPO4 = x(16); % conc. en P soluble (H3PO4)
 XPHA = x(17); % conc. en PHB
 XPP = x(18); % conc. en polyP (HPO3)
 XGLY = x(19); % conc. en glycogène
 Mg = x(20); % conc. en Magnesium
 XHDP = x(21); % conc. en XHDP
 XHAP = x(22); % conc. en XHAP
 XFeOH = x(23); % conc. en hydroxyde de metal
 XFeP = x(24); % conc. en complexe métal/phosphore
 K = x(25); % conc. en potassium

%%% Hydrolyse

fSI = 0; % Fraction de SI (substrat soluble inerte) genere dans la reaction d'hydrolyse

%%% Fractions des composés de stockage sur la biomasse active (varient au cours d'un cycle)

fgly = XGLY/XPAO; % fraction du glycogène stocké intracellulairement sur la biomasse bioP active
 fpp = XPP/XPAO; % fraction des poly-P stockés intracellulairement sur la biomasse bioP

fphb = XPHA/XPAO; % fraction du PHB stocké intracellulairement sur la biomasse bioP active

%%% Constantes stoechiométriques

%% HETEROTROPHES

YH = 0.63 ; %taux de croissance de la biomasse hétérotrophe sur XSTO(gDCO-XH formée/g XSTO consommé-DCO)

YSTO = 0.8 ; % coefficient de rendement de XSTO sur SS (rapport XSTO produits sur SS consommé) (g XSTO/gDCO - SS)

%%% Coefficients relatifs a l'aération

% Kla = ; % Coefficient de transfert d'oxygène (defini dans le programme d'appel)

%%% COEFFICIENTS STOECHIMETRIQUES

%% Oxygène

x2 = (-1 + YSTO);
 x2a = (-1 + YSTO);
 x4 = (1 - 1./YH);
 x6 = -(1 - fI);
 x8 = (-1);
 x10 = -(4.57 - YAUT)./YAUT;
 x11 = -(1 - fI);
 x15 = (1./YPHAO) - 1;
 x16 = -(1./YPPPO);
 x17 = 1 - (1./YGLYO);
 x18 = -1;

%% nitrates

x3 = (YSTO - 1)./2.86;
 x3a = (YSTO - 1)./2.86;
 x5 = -(1-YH)./(2.86.*YH);
 x7 = -(1 - fI)./2.86;
 x9 = -1./2.86;
 x12 = -(1 - fI)./2.86;
 x19 = ((1 - YPHANO)./(2.86.*YPHANO));
 x20 = -1./2.86.*YPPNO;
 x21 = ((YGLYNO - 1)./(YGLYNO.*2.86));
 x22 = (-1./2.86);

%% Pour le N ammoniacal :

cln = - iNSI.*fSI - (1 - fSI).*iNSF + iNXS;

```

c2n = iNSF;
c3n = iNSF;
c4n = - iNBM;
c5n = - iNBM;
c6n = -fI.*iNXI + iNBM;
c7n = -fI.*iNXI + iNBM;
c9an = iNSF;
c10n = -1./YAUT - iNBM;
c11n = -fI.*iNXI + iNBM;
c12n = -iNXI.*fI + iNBM;
c15n = -iNBM./YPHAO;
c16n = iNBM./YPPO;
c17n = iNBM./YGLYO;
c18n = (mPAOO./mO2).*iNBM;
c19n = -iNBM./YPHANO;
c20n = iNBM./YPPNO;
c21n = iNBM./YGLYNO;
c22n = (mPAONO./mNO).*iNBM;

```

%% Pour le phosphore soluble - A partir du bilan sur P

```

c1p = -fSI.*iPSI - (1 - fSI).*iPSF + iPXS;
c2p = iPSF;
c3p = iPSF;
c4p = -iPBM;
c5p = -iPBM;
c6p = -fI.*iPXI + iPBM;
c7p = -fI.*iPXI + iPBM;
c9ap = - iPSF;
c10p = -iPBM;
c11p = -fI.*iPXI + iPBM;
c12p = - fI.*iPXI + iPBM;
c13p = YPO4;
c14p = 1;
c15p = -iPBM./YPHAO;
c16p = iPBM./YPPO - 1;
c17p = iPBM./YGLYO;
c18p = (mPAOO./mO2).*iPBM;
c19p = -iPBM./YPHANO;
c20p = iPBM./YPPNO - 1;
c21p = iPBM./YGLYNO;
c22p = (mPAONO./mNO).*iPBM;

```

%% Pour l'alcalinité - A partir du bilan de charges

```

z1 = (1/14).*c1n + (-1.5/31).*c1p;
z2 = (1/14).*c2n + (-1.5/31).*c2p;
z2a = 1/64;

```

```

z3 = (1/14).*c3n + (-1/14).*x3 + (-1.5/31).*c3p;
z3a = 1/64;
z4 = (1/14).*c4n + (-1.5/31).*c4p;
z5 = (1/14).*c5n + (-1/14).*x5 + (-1.5/31).*c5p;
z6 = (1/14).*c6n + (-1.5/31).*c6p;
z7 = (1/14).*c7n + (-1/14).*x7 + (-1.5/31).*c7p;
z9 = (-1/14).*x9;
z9a = (-1/64);
z10 = (1/14).*c10n + (-1/14).*(1./YAUT) + (-1.5/31).*c10p;
z11 = (1/14).*c11n + (-1.5/31).*c11p;
z12 = (1/14).*c12n + (-1/14).*x12 + (-1.5/31).*c12p;
z13 = 1/64 + (-1.5/31).*YPO4;
z14 = -1.5/31;
z15 = (-1.5/31).*c15p + (1/14).*c15n;
z16 = (1/14).*c16n + (-1.5/31).*c16p;
z17 = (1/14).*c17n + (-1.5/31).*c17p;
z18 = (1/14).*c18n + (-1.5/31).*c18p;
z19 = (1/14).*c19n + (-1.5/31).*c19p + (-1/14).*x19;
z20 = (1/14).*c20n + (-1/14).*x20 + (-1.5/31).*c20p;
z21 = (1/14).*c21n + (-1.5/31).*c21p + (-1/14).*x21;
z22 = (1/14).*c22n + (-1.5/31).*c22p + (-1/14).*x22;

```

```

%% Pour les MES -

```

```

t1 = -iTSSXS;
t2 = 0.60.*YSTO;
t2a = 0.60.*YSTO;
t3 = 0.60.*YSTO;
t3a = 0.60.*YSTO;
t4 = iTSSBM - 0.60.*(1./YH);
t5 = iTSSBM - 0.60.*(1./YH);
t6 = -iTSSBM + fI.*iTSSXI;
t7 = -iTSSBM + fI.*iTSSXI;
t8 = -0.60;
t9 = -0.60;
t10 = iTSSBM;
t11 = -iTSSBM + fI.*iTSSXI;
t12 = -iTSSBM + fI.*iTSSXI;
t13 = 0.60.*YPHA - 0.84.*YGLY - 3.23.*YPO4.*0.60;
t14 = (-1).*3.23;
t15 = (1./YPHAO).*iTSSBM - 0.60;
t16 = (-1./YPPO).*iTSSBM + 3.23;
t17 = (-1./YGLYO).*iTSSBM + 0.84;
t18 = (-mPAOO./mO2).*iTSSBM;
t19 = (1./YPHANO).*iTSSBM - 0.60;
t20 = (-1./YPPNO).*iTSSBM + 3.23;
t21 = (-1./YGLYNO).*iTSSBM + 0.84;
t22 = (-mPAONO./mNO).*iTSSBM;

```

```

t23 = 1.42; % valeur preliminaire tiree de ASM2 (mais qui concerne le
fer)

```

*** REACTIONS

%% ASM3 - Hétérotrophes

% Hydrolyse

$$r1 = kh \cdot \left(\frac{XS}{XH} \right) / (Kx + \frac{XS}{XH}) \cdot XH;$$

% Stockage aérobie de SF

$$r2 = kSTO \cdot \left(\frac{So}{KO + So} \right) \cdot \left(\frac{SF}{Ks + SF} \right) \cdot XH;$$

% Stockage aérobie de SA

$$r2a = kSTO \cdot \left(\frac{So}{KO + So} \right) \cdot \left(\frac{SA}{Ks + SA} \right) \cdot XH;$$

% Stockage anoxie de SF

$$r3 = kSTO \cdot \eta_{HNO3} \cdot \left(\frac{KO}{KO + So} \right) \cdot \left(\frac{SNO}{KNO + SNO} \right) \cdot \left(\frac{SF}{Ks + SF} \right) \cdot XH;$$

% Stockage anoxie de SA

$$r3a = kSTO \cdot \eta_{HNO3} \cdot \left(\frac{KO}{KO + So} \right) \cdot \left(\frac{SNO}{KNO + SNO} \right) \cdot \left(\frac{SA}{Ks + SA} \right) \cdot XH;$$

% Croissance aérobie des heterotrophes sur XSTO

$$r4 = \mu_H \cdot \left(\frac{So}{KO + So} \right) \cdot \left(\frac{SNH}{KNH + SNH} \right) \cdot \left(\frac{SHCO}{KHCO + SHCO} \right) \cdot \left(\frac{XSTO}{XH} \right) / (KSTO + \frac{XSTO}{XH}) \cdot XH;$$

% Croissance anoxie des heterotrophes sur XSTO (DN)

$$r5 = \mu_H \cdot \eta_{HNO3} \cdot \left(\frac{KO}{So + KO} \right) \cdot \left(\frac{SNO}{KNO + SNO} \right) \cdot \left(\frac{SNH}{KNH + SNH} \right) \cdot \left(\frac{SHCO}{KHCO + SHCO} \right) \cdot \left(\frac{XSTO}{XH} \right) / (KSTO + \frac{XSTO}{XH}) \cdot XH;$$

% Respiration endogène aérobie

$$r6 = bHO2 \cdot \left(\frac{So}{KO + So} \right) \cdot XH;$$

% Respiration endogène anoxie

$$r7 = bHNO \cdot \left(\frac{KO}{KO + So} \right) \cdot \left(\frac{SNO}{KNO + SNO} \right) \cdot XH;$$

% Respiration aérobie de XSTO

$$r8 = bSTO2 \cdot \left(\frac{So}{KO + So} \right) \cdot XSTO;$$

% Respiration anoxie du PHA

$$r9 = bSTONO \cdot \left(\frac{KO}{KO + So} \right) \cdot \left(\frac{SNO}{KNO + SNO} \right) \cdot XSTO;$$

% Fermentation

$$r9a = q_{fe} \cdot \left(\frac{KO}{KO + So} \right) \cdot \left(\frac{KNO}{KNO + SNO} \right) \cdot \left(\frac{SF}{K_{fe} + SF} \right) \cdot \left(\frac{SHCO}{KHCO + SHCO} \right) \cdot XH;$$

%% Autotrophes (ASM3)

% Nitrification (croissance des autotrophes)


```

r10 = nuAUT.*(So./(KAO + So)).*(SNH./(KANH + SNH)).*(SHCO./(KAHCO +
SHCO)).*XA ;

% Respiration endogène aérobie
r11 = bAO2.*(So./(KAO + So)).* XA;

% Respiration endogène anoxie
r12 = bANO.*(KO./(KO + So)).*(SNO./(KNO + SNO)).*XA;

%% PAO (Murnleitner ou TUDelft)

%% en conditions anaérobies:

% Consommation de l'acétate en conditions anaérobies (Stockage du PHA)
r13 = qsmx.*(SA./(SA + KPA)).*(KPO2./(So + KPO2)).*(KPN03./(SNO +
KPN03)).*(XGLY./(KPGLY + XGLY)).*(XPP./(KPPP + XPP)).*XPAO;%rac

% Relargage du P soluble pour la maintenance anaérobie (Maintenance)

r14 = mAN.*(KPO2./(So + KPO2)).*(KPN03./(SNO + KPN03)).*(XPP./(KPPP +
XPP)).*XPAO;

%% en conditions aérobies:

% Consommation de PHA
r15 = kPHA.*(fphb^(2/3)).*(So./(KPO2 + So)).*(SPO4./(KHP +
SPO4)).*(SNH./(KPNH4 + SNH)).*(SHCO./(KPALK + SHCO)).*XPAO; %rphbaer

% Synthèse (et stockage) des poly-P
r16 = kPP.*(1./fpp).*(SPO4./(KPP04 + SPO4)).*(So./(KPO2.*gPP +
So)).*((KPPMAX - fpp)/(1.05.*KPPMAX - fpp)).*(Mg./(Mg + 10)).*XPAO
;%*(Mg./(Mg + 10))

% Formation du glycogène
r17 = kGLY.*((fphb^(2/3))./(fgly)).*(So./(KPO2 + So)).*XPAO;%rglyae

% Utilisation de l'ATP pour la maintenance aérobie
r18 = mO2.*(So./(KPO2 + So)).*(XPHA./(KPPHA + XPHA)).*XPAO; %ratpmainae

%% en conditions anoxies

% Consommation du PHA en conditions anoxies

r19 = etaPNO3.*kPHA.*(fphb^(2/3)).*(SNO./(SNO + KPN03)).*(KO./(KO +
So)).*(SNH./(KPNH4 + SNH)).*(SPO4./(KHP + SPO4)).*(SHCO./(KPALK +
SHCO)).*XPAO; %rphbdenit

```

% Formation des poly-P en conditions anoxies

```
r20 = etaPNO3.*kPP.*(1./fpp).*(SNO./(SNO + KPNO3)).*(SPO4./(KPP04.*gPP
+ SPO4)).*(KO./(So + KO)).*((KPPMAX - fpp)/(1.05.*KPPMAX -
fpp)).*(Mg./(Mg + 10)).*XPAO;%rppdenit % .*(Mg./(Mg + 10))
```

% Formation du glycogène en conditions anoxies

```
r21 = etaPNO3.*kGLY.*((fphb^(2/3))./(fgly)).*(SNO./(KPNO3 +
SNO)).*(KO./(KO + So)).*XPAO;%rglydenit
```

% Utilisation de l'ATP pour la maintenance anoxie

```
r22 = mNO.*(SNO./(SNO + KPNO3)).*(KPO2./(KPO2 + So)).*(XPHA./(KPPHA +
XPHA)).*XPAO;%ratpmaintden
```

%% Précipitation

% Formation de HDP

```
r23 = kHDP.*0.46.*SPO4.*0.66.*SCa.*(KHDP1./(KHDP1 + XHDP./XTSS));
```

% Redissolution du HDP

```
r24 = ((kHDP.*(10^(-22.6))./(1.94e-14)).*((10^(2*(14 -
pH)))./(0.66.*SCa)).*((XHDP./XTSS)./((XHDP./XTSS) + KHDP2)));
```

% Formation de HAP

```
r25 = kHAP.*((XHDP./XTSS)./(XHDP./XTSS + KHDP2));
```

% Formation d'un précipité métal/phosphore

```
r26 = kpreFEP.*SPO4.*XFeOH;
```

% Redissolution du précipité

```
r27 = kpreFEP.*XFeP.*(SHCO./(SHCO + KHCO));
```

%%% TAUX DE REACTION (pour un RBS) exprimes en mg X/L • d

% Oxygène

```
dsodt = K1a.*(8.5 - So) + x2.*r2 + x2a.*r2a + x4.*r4 + x6.*r6 +
x8.*r8 + x10.*r10 + x11.*r11 + x15.*r15 + x16.*r16 + x17.*r17 +
x18.*r18;
```

```
if So<=1e-10
```

```
So = 0;
```

```
end
```

```
if So>=8.5
```

```
So = 8.5;
```

```
end
```

```
% Substrat Inerte
```

```
    dSIIdt = fSI.*r1;
```

```
if SI<= 1e-10
```

```
    SI = 0;
```

```
end
```

```
% Substrat organique fermentable
```

```
dSFdt = (1 - fSI).*r1 + (-1).*r2 + (-1).*r3 + (-1).*r9a ;
```

```
if SF<= 1e-10
```

```
    SF = 0;
```

```
end
```

```
%Azote ammoniacal
```

```
    dSNHdt = c1n.*r1 + c2n.*r2 + c3n.*r3 + c4n.*r4 + c5n.*r5 + c6n.*r6  
+ c7n.*r7 + c9an.*r9a + c10n.*r10 + c11n.*r11 + c12n.*r12 + c15n.*r15  
+ c16n.*r16 + c17n.*r17 + c18n.*r18 + c19n.*r19 + c20n.*r20 + c21n.*r21  
+ c22n.*r22;
```

```
if SNH<= 1e-10
```

```
    SNH = 0;
```

```
end
```

```
%Azote
```

```
    dSN2dt = (-x3).*r3 + (-x3a).*r3a + (-x5).*r5 + (-x7).*r7 + (-x9).*r9  
+ (-x12).*r12 + (-x19).*r19 + (-x20).*r20 + (-x21).*r21 + (-x22).*r22;
```

```
if SN2<= 1e-10
```

```
    SN2 = 0;
```

```
end
```

```
%Nitrates
```

```
    dSNOdt = x3.*r3 + x3a.*r3a + x5.*r5 + x7.*r7 + x9.*r9 +  
(1./YAUT).*r10 + x12.*r12 + x19.*r19 + x20.*r20 + x21.*r21 + x22.*r22;
```

```
if SNO <= 1e-10
```

```
    SNO = 0;
```

```
end
```

```
%Alcalinité (moles d'ions bicarbonates)
```

```
dSHCOdt = z1.*r1 + z2.*r2 + z2a.*r2a + z3.*r3 + z3a.*r3a + z4.*r4 +  
z5.*r5 + z6.*r6 + z7.*r7 + z9.*r9 + z9a.*r9a + z10.*r10 + z11.*r11 +
```

```

z12.*r12 + z13.*r13 + z14.*r14 + z15.*r15 + z16.*r16 + z17.*r17 +
z18.*r18 + z19.*r19 + z20.*r20 + z21.*r21 + z22.*r22;

```

```

if SHCO <= 1e-10
    SHCO = 0;
end

```

```

%Matière inerte particulaire

```

```

dXIdt = fI.*r6 + fI.*r7 + fI.*r11 + fI.*r12;

```

```

if XI <= 1e-10
    XI = 0;
end

```

```

%Substrat lentement biodégradable

```

```

dXSdt = (-1).*r1;

```

```

if XS <= 1e-10
    XS = 0;
end

```

```

%Biomasse hétérotrophe

```

```

dXHdt = 1.*r4 + 1.*r5 + (-1).*r6 + (-1).*r7;

```

```

if XH <= 1e-10
    XH = 0;
end

```

```

% Composé de stockage

```

```

dXSTOdt = YSTO.*r2 + YSTO.*r2a + YSTO.*r3 + YSTO.*r3a + (-1./YH).*r4
+ (-1./YH).*r5 + (-1).*r8 + (-1).*r9;

```

```

if XSTO <= 1e-10
    XSTO = 0;
end

```

```

%Biomasse autotrophe

```

```

dXAdt = 1.*r10 + (-1).*r11 + (-1).*r12;

```

```
if XA <= 1e-10
```

```
    XA = 0;
```

```
end
```

```
% Matières en suspension totales
```

```
    dXTSSdt = t1.*r1 + t2.*r2 + t2a.*r2a + t3.*r3 + t3a.*r3a + t4.*r4 +  
t5.*r5 + t6.*r6 + t7.*r7 + t8.*r8 + t9.*r9 + t10.*r10 + t11.*r11 +  
t12.*r12 + t13.*r13 + t14.*r14 + t15.*r15 + t16.*r16 + t17.*r17 +  
t18.*r18 + t19.*r19 + t20.*r20 + t21.*r21 + t22.*r22 + 6.78.*r23 + (-  
6.78).*r24 + (-1.37).*r25; % + 1.42.*r26 + (-1.42).*r27;
```

```
if XTSS <= 1e-10
```

```
    XTSS = 0;
```

```
end
```

```
%Biomasse bioP active
```

```
    dXPAOdt = (1./YPHAO).*r15 + (-1./YPPO).*r16 + (-1./YGLYO).*r17 + (-  
mPAOO./mO2).*r18 + 0.61.*(1./YPHANO).*r19 + (-1./YPPNO).*r20 + (-  
1./YGLYNO).*r21 + (-mPAONO./mNO).*r22;
```

```
if XPAO <= 1e-10
```

```
    XPAO = 0;
```

```
end
```

```
% Acétate
```

```
    dSAdt = (-1).*r2a + (-1).*r3a + 1.*r9a + (-1).*r13 ;
```

```
if SA <= 1e-10
```

```
    SA = 0;
```

```
end
```

```
% Phosphore soluble (O-PO4)
```

```
    dSPO4dt = c1p.*r1 + c2p.*r2 + c3p.*r3 + c4p.*r4 + c5p.*r5 + c6p.*r6 +  
c7p.*r7 + c9ap.*r9a + c10p.*r10 + c11p.*r11 + c12p.*r12 + YPO4.*r13 +  
1.*r14 + c15p.*r15 + c16p.*r16 + c17p.*r17 + c18p.*r18 + c19p.*r19 +  
c20p.*r20 + c21p.*r21 + c22p.*r22 + (-1).*r23 + 1.*r24 + (-1).*r26 +  
1.*r27;% + 1.*r14 + YPO4.*r13
```

```
if SPO4 <= 1e-10
```

```
    SPO4 = 0;
```

```
end
```

% PHB

$dXPHAdt = YPHA \cdot r_{13} + (-1) \cdot r_{15} + (-1) \cdot r_{19};$

if XPHA <= 1e-10
XPHA = 0;
end

% poly-P

$dXPPdt = (-YPO4) \cdot r_{13} + (-1) \cdot r_{14} + 1 \cdot r_{16} + 1 \cdot r_{20};$ %+ (-1) \cdot r_{14}

if XPP <= 1e-10
XPP = 0;
end

%glycogène

$dXGLYdt = (-YGLY) \cdot r_{13} + 1 \cdot r_{17} + 1 \cdot r_{21};$

if XGLY <= 1e-10
XGLY = 0;
end

% Magnésium

$dMgdt = 0.157 \cdot (c1p \cdot r_1 + c2p \cdot r_2 + c3p \cdot r_3 + c4p \cdot r_4 + c5p \cdot r_5 + c6p \cdot r_6 + c7p \cdot r_7 + c9ap \cdot r_{9a} + c10p \cdot r_{10} + c11p \cdot r_{11} + c12p \cdot r_{12} + YPO4 \cdot r_{13} + 1 \cdot r_{14} + c15p \cdot r_{15} + c16p \cdot r_{16} + c17p \cdot r_{17} + c18p \cdot r_{18} + c19p \cdot r_{19} + c20p \cdot r_{20} + c21p \cdot r_{21} + c22p \cdot r_{22} + (-1) \cdot r_{23} + 1 \cdot r_{24} + (-1) \cdot r_{26} + 1 \cdot r_{27});$

% XHDP

$dXHDPdt = 1 \cdot r_{23} + (-1) \cdot r_{24} + (-1) \cdot r_{25};$

%XHAP

$dXHAPdt = 1 \cdot r_{25};$

% Précipité d'Hydroxyde de metal
 $dXFeOHdt = (-3.45) \cdot r_{26} + 3.45 \cdot r_{27};$

% Precipite de Metal/Phosphore
 $dXFePdt = 4.87 \cdot r_{26} + (-4.87) \cdot r_{27};$

```
% Potassium
```

```
dKdt = 0.55.*(c1p.*r1 + c2p.*r2 + c3p.*r3 + c4p.*r4 + c5p.*r5 + c6p.*r6
+ c7p.*r7 + c9ap.*r9a + c10p.*r10 + c11p.*r11 + c12p.*r12 + YPO4.*r13 +
1.*r14 + c15p.*r15 + c16p.*r16 + c17p.*r17 + c18p.*r18 + c19p.*r19 +
c20p.*r20 + c21p.*r21 + c22p.*r22 + (-1).*r23 + 1.*r24 + (-1).*r26 +
1.*r27);
```

```
dxdt = [dSodt dSI dt dSFdt dSNHdt dSN2dt dSN0dt dSHCOdt dXIdt dXSdt
dXHdt dXSTOdt dXTSSdt dXAdt dXPAOdt dSAdt dSPO4dt dXPHAdt dXPPdt
dXGLYdt dMgdt dXHDPdt dXHAPdt dXFeOHdt dXFePdt dKdt]';
```

A.2.3 Programme appelé pour la phase de sédimentation

Identique au programme appelé pour les phases non aérée et aérée sauf pour la partie « taux de réactions », présentée ci-dessous :

```
%%% TAUX DE REACTION (pour un RBS) exprimes en mg X/L • d
```

```
% Oxygène
```

```
%if So<=1e-10
```

```
    % So = 0;
```

```
    % end
```

```
dSodt = 0;
```

```
% Substrat inerte
```

```
%if SI<=1e-10
```

```
    % SI = 0;
```

```
    %end
```

```
dSI dt = 0;
```

```
% Substrat organique fermentable
```

```
%if SS<=1e-10
```

```
    %SS = 0;
```

```
    % end
```

```
dSFdt = 0;
```

```
%Azote ammoniacal
```

```
%if SNH <= 1e-10
```

```
    % SNH = 0;
```

```
    %end
```

```
dSNHdt =0;
```

```
% Azote
```

```
%if SN2<= 1e-10
```

```
    % SN2 = 0;
```

```

        %end
dSN2dt = 0;

%Nitrates

%if SNO <=1e-10
    %SNO = 0;
    %end
dSN0dt = 0;

%Alcalinité (moles d'ions bicarbonates)

%if SHCO <=1e-10
    %SHCO = 0;
    %end
dSHCOdt = 0;

% Substrat particulaire inerte

%if XI <=1e-10
    % XI = 0;
    %end
dXI dt = 0;

%Substrat lentement biodégradable

%if XS <=1e-10
    %XS = 0;
    %end

dXSdt = 0;

%Biomasse hétérotrophe

%if XH <= 1e-10
    %XH = 0;
    %end

dXHdt = 0;

% Composé de stockage

%if XSTO <= 1e-10
    %XSTO = 0;
    %end

dXSTOdt = 0;

%Biomasse autotrophe

%if XA <= 1e-10

```



```
%XA = 0;
%end

dXAdt = 0;

% Matières en suspension totales

%if XTSS <= 1e-10
    %XTSS = 0;
%end

dXTSSdt = 0;

%Biomasse bioP active

%if XPAO <= 1e-10
    %XPAO = 0;
%end

dXPAOdt = 0;

% Acétate

%if SA <= 1e-10
    %SA = 0;
%end

dSAdt = 0;

% Phosphore soluble (O-PO4)

%if SPO4 <= 1e-10
    %SPO4 = 0;
%end

dSPO4dt = 0;

% PHB

%if XPHA <= 1e-10
    %XPHA = 0;
%end

dXPHAdt = 0;

% poly-P

%if XPP <= 1e-10
    %XPP = 0;
%end
```

```

dXPPdt = 0;

%glycogène
%if XGLY <= 1e-10
    %XGLY = 0;
%end

dXGLYdt = 0;

% Magnésium

dMgdt = 0;

% HDP

dXHDPdt = 0;

% HAP

dXHAPdt = 0;

% Précipité d'hydroxyde de fer
dXFeOHdt = 0 ;

% Précipité de Métal/Phosphore
dXFePdt = 0;

% K

dKdt = 0;

dxdt = [dSodt dSIIdt dSFdt dSNHdt dSN2dt dSN0dt dSHCOdt dXIdt dXSdt
dXHdt dXSTOdt dXTSSdt dXAdt dXPAOdt dSAdt dSPO4dt dXPHAdt dXPPdt
dXGLYdt dMgdt dXHDPdt dXHAPdt dXFeOHdt dXFePdt dKdt ]'; %dMgdt

```

Une disquette accompagne ce mémoire de maîtrise.

**Toute personne intéressée à se la procurer doit
contacter :**

École Polytechnique de Montréal

Service de fourniture de documents

B.P. 6079, Succursale Centre-Ville

Montréal, Québec H3C 3A7

Canada

Tél. : (514) 340-4846

Télécopieur : (514) 340-4026